



Universidad
Politécnica
de Cartagena



industriales
etsii UPCT

Análisis numérico de la distribución del tiempo de residencia en tipologías avanzadas de mezcladores tubulares

Titulación: Ingeniero Industrial
Intensificación: Sistemas Eléctricos
Alumno/a: Daniel Femenía Martínez
Director/a/s: Juan Pedro Solano Fernández

Cartagena, 20 de Septiembre de 2015

Resumen

Los reactores de flujo oscilatorio (OBR) son equipos tubulares aptos para el mezclado, en los que se superpone un flujo neto y un flujo oscilatorio. La velocidad del flujo neto que atraviesa el tubo es propia de un flujo laminar con muy bajo número de Reynolds, mientras que las velocidades superpuestas por la oscilación de tipo sinusoidal pueden ser de hasta tres órdenes de magnitud mayor. Los tubos contienen elementos insertados que promueven el mezclado radial -típicamente coronas circulares- y que proporcionan características de flujo pistón (*plug flow*) a la vez que se alcanzan tiempos de residencia muy altos.

Una de las técnicas para evaluar el mezclado en este tipo de dispositivo es analizar la evolución temporal de la concentración de un trazador en la salida de los tubos, cuando en la entrada se inyecta un pulso de concentración de los mismos.

Basándose en este procedimiento, en este proyecto se acomete la modelización del transporte de trazadores en un reactor tubular avanzado, entendiéndose estos como variaciones de las configuraciones clásicas de tubos con coronas circulares: 1) equipos con placas fijas con flujo oscilatorio anormal; 2) equipos con placas oscilatorias; 3) equipos con flujo oscilatorio superpuesto con placas oscilatorias.

Se ha observado una pequeña mejora en la utilización de un flujo anormal (ABN) con respecto al flujo clásico (NRM), aunque creemos que ésta no es significativa comparada con la dificultad de implementar este tipo de flujo en un OBR.

La implementación de equipos con placas oscilatorias se puede modelizar mediante la metodología Moving Reference Frame (MRF) y Malla Deformable (MD). Tras el análisis se considera que ambas metodologías son equivalentes.

MD presenta la limitación de utilizar un *time-step* (paso de tiempo) inferior a la condición CFL a causa de la generación de celdas de área negativa.

Se observa una gran mejora en la utilización de equipos con placas oscilatorias, obteniéndose curvas RTD mas esbeltas y con menor varianza que en los equipos con flujo oscilatorio. El movimiento de las placas consigue un buen mezclado sin la aparición de zonas muertas en las que el trazador queda retenido. La implementación de equipos con placas oscilatorias y flujo oscilatorio de forma combinada, no mejora el proceso de mezcla, al generar una mayor dispersión axial.

La principal conclusión que se ha obtenido en este PFC, es la posibilidad de poder implementar la modelización de OBRs con placas móviles mediante dos metodologías equivalentes, así como también la mejora que se obtiene con este tipo de reactores con respecto a OBRs con flujo oscilatorio.

Palabras clave: OBR, flujo oscilatorio, placas oscilatorias, moving reference frame, malla deformable, transporte de especies, patrón de flujo, CFD.

ÍNDICE

Resumen	3
---------------	---

BLOQUE I

Generalidades.....	9
---------------------------	----------

Capítulo 1 : Generalidades reactores de flujo oscilatorio y objetivos 11

1.1. Reactores de Flujo oscilatorio	11
1.2. Mecanismos de mezcla	14
1.3. Números adimensionales que caracterizan el flujo	15
1.4. Características del flujo "Pistón" o "Plug Flow"	15
1.5. ¿Cómo puede evaluarse el flujo pistón?	17
1.6. Métodos utilizados para estudiar la bondad del mezclado	18
1.6.1. Proporción de velocidad axial a transversal	18
1.6.2. Tasa de estiramiento y giro.....	19
1.6.3. Dispersión axial	19
1.6.4. Distribución de tiempos de residencia (RTD)	20
1.7. Determinación de la distribución de tiempos de residencia (RTD).....	21
1.8. Ley de Fick.....	23
1.9. Ventajas, limitaciones y algunas aplicaciones	25
1.10. Tubo liso sin diafragmas ($Re_n=230$)	26
1.11. Tubo liso sin diafragmas ($Re_n=10000$)	28
1.12. Objetivos	30
1.13. Definición del problema.....	31

Capítulo 2 : Metodología de simulación numérica..... 33

2.1. Transporte de especies en Fluent	33
2.1.1. Definición de la zona de inyección en Gambit.....	33
2.1.2. Importación a Fluent y creación del reactor	35
2.1.3. Modelado del transporte de especies	37
2.2. Ajustes	42
2.2.1. Modelo	42
2.2.2. Residuos	43

2.2.3.	Evaluación de las magnitudes fluidas	44
2.2.4.	Paso de tiempo.	47
2.2.5.	Condiciones de contorno	49
2.3.	Inyección de especies	51
2.3.1.	Inyección impulso.	52
2.3.2.	Evaluación de la cantidad de trazador que se ha inyectado.	53
2.3.3.	Inyección escalón	57
2.4.	Distancia de seguridad para inyectar el trazador	58
2.4.1.	Método de las secciones.....	59
2.5.	Evaluación de la cantidad de trazador que escapa por la entrada y la salida.....	63

BLOQUE II

Flujo oscilatorio	67
--------------------------------	-----------

Capítulo 3: Estudio de OBR con flujo oscilatorio y deflectores fijos. 69

3.1.	Definición del dominio computacional.	69
3.2.	Geometría estudiada.	70
3.3.	Metodología de simulación	71
3.3.1.	Periodicidad temporal	72
3.3.2.	Periodicidad espacial	72
3.4.	Resolución del problema	73
3.4.1.	Definición de las condiciones periódicas en la entrada y la salida	73
3.4.2.	Obtención del perfil de velocidad en el plano central.....	75
3.4.3.	Carga del perfil en el OBR de 110 pasos	77
3.4.4.	Archivos journal	77
3.5.	Composición de velocidades de entrada, flujo neto más flujo oscilatorio. Casos de estudio	78
3.5.1.	Normal oscillatory conditions (NRM)	78
3.5.2.	Abnormal oscillatory conditions (ANB).....	79
3.6.	Condiciones de operación	82
3.7.	Visualización de patrones de flujo e inyección de trazador	84
3.7.1.	Normal oscillatory conditions	84
3.7.2.	Abnormal oscillatory conditions	85
3.7.3.	Visualización de la inyección.....	86
3.8.	Resultados	87

3.8.1.	Curvas de concentración y curvas adimensionales	87
3.8.2.	Normal oscillatory conditions (NRM)	90
3.8.3.	Abnormal oscillatory conditions (ABN).....	91
3.8.4.	Comparación entre NRM y ABN	91

BLOQUE III

Deflectores móviles	95
----------------------------------	-----------

Capítulo 4: Estudio de OBR con deflectores móviles..... 97

4.1.	Definición del dominio computacional	97
4.2.	Geometría estudiada	98
4.3.	Metodología de simulación	99
4.3.1.	Periodicidad temporal	100
4.3.2.	Periodicidad espacial.	101
4.4.	Condiciones de operación	101
4.5.	Metodologías de resolución	102
4.6.	Patrones de flujo e inyección de especies.....	102

Capítulo 5: Moving Reference Frame 105

5.1.	Metodología Moving Reference Frame.....	105
5.2.	Análisis de la metodología MRF	110
5.3.	Resultados OBR con deflectores móviles (MRF)	111
5.4.	Resultados OBR con deflectores móviles y flujo oscilatorio (MRF)	112

Capítulo 6: Malla deformable 115

6.1.	Metodología Malla deformable.....	115
6.1.1.	Definición de la malla dinámica en FLUENT.	115
6.1.2.	Simulación de casos sucesivos mediante una UDF.....	117
6.1.3.	Aspectos constructivos del dominio computacional	118
6.1.4.	Denominación de las regiones fluidas en Fluent.....	119
6.1.5.	Definición de parámetros y zonas en la malla dinámica en Fluent.	120
6.2.	Análisis de la metodología MD	122
6.3.	Resultados OBR con deflectores móviles (MD).....	123
6.4.	¿Son Moving Reference Frame (MRF) y Malla Deformable (MD) dos metodologías equivalentes?.....	123

6.5. Comparación entre Flujo oscilatorio y Diafragmas móviles.....	128
Conclusiones del estudio	131
Referencias bibliográficas.....	133

BLOQUE I

Generalidades

Capítulo 1 : Generalidades reactores de flujo oscilatorio y objetivos

1.1. Reactores de Flujo oscilatorio

Un **reactor de flujo oscilatorio** (OBR: Oscillatory Baffled Reactor) [1], [2] consiste en un conducto liso de sección transversal circular con deflectores insertados espaciados de manera equidistante.

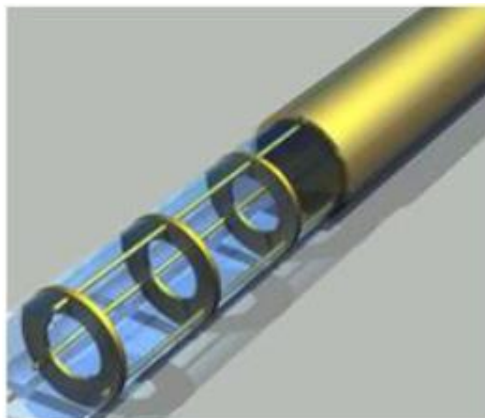


Figura 1.1-Forma típica de un reactor de flujo oscilatorio con diafragmas insertados.

En la Figura 1.1 se muestra la forma típica de un OBR donde los elementos insertados son diafragmas con un único orificio. Son muchos otros elementos los que se pueden emplear, en la Figura 1.2 se muestran algunos ejemplos.



Figura 1.2-Ejemplo de elementos insertados en OBR

Existen dos variantes de OBR en función de cómo se consigue el flujo oscilatorio (véase Figura 1.3). Por un lado están los OBR-MB (Moving Baffles) donde es la estructura de deflectores insertados la que oscila, provocando el movimiento del fluido. Por otro lado, los OBR-MF (Moving Fluid), donde se impone directamente al fluido un movimiento oscilatorio mediante, por ejemplo, un pistón en uno de los extremos del conducto.

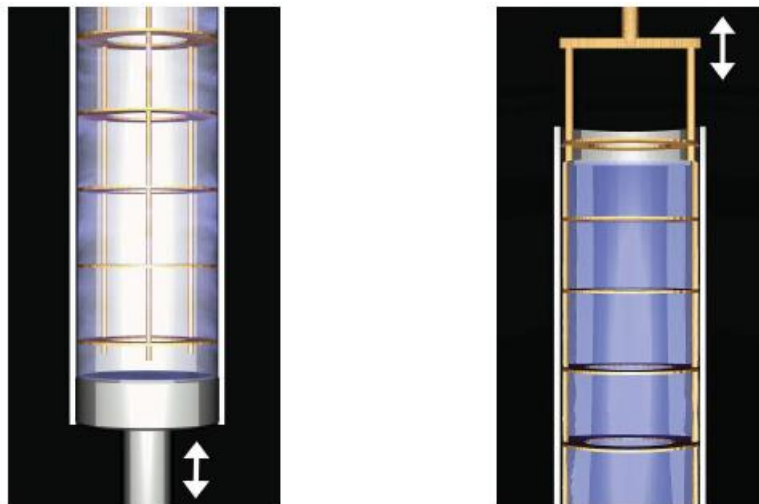


Figura 1.3-A la izquierda OBR con deflectores fijos, a la derecha OBR con deflectores móviles

La periodicidad geométrica que existe en dirección longitudinal del reactor permite definir lo que llamamos “paso” del reactor, como la región de longitud L encerrada entre dos deflectores consecutivos. Un OBR a escala industrial puede contener cientos de pasos (véase Figura 1.5).

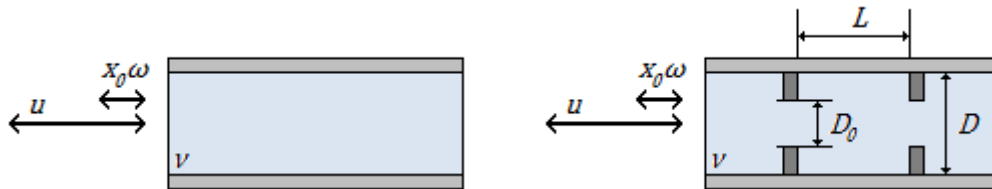


Figura 1.4- Parámetros de caracterización del flujo oscilatorio. Izquierda, flujo oscilatorio puro (POF). Derecha, flujo oscilatorio con orificios deflectores (OBF).

En el caso de un OBR con flujo oscilatorio, el flujo que circula por el interior del reactor está compuesto por un **flujo neto**, caracterizado por una velocidad constante a lo largo del tiempo y un bajo número de Reynolds, sobre el que se superpone un **flujo oscilatorio**, cuya velocidad sigue una ley sinusoidal con el tiempo [3] (Figura 1.4).



Figura 1.5-OBR a escala industrial, formado por cientos de pasos.

El objetivo de los deflectores, o elementos insertados, es favorecer un mejor mezclado en el interior del reactor con la estrangulación y relajación de la sección del tubo que genera vórtices en las proximidades de los deflectores [1].

1.2. Mecanismos de mezcla

Los OBR se emplean como método de mezclado y tienen una aplicación en una amplia variedad de campos.

Los vórtices que se generan aguas abajo de cada deflector, interaccionan de forma compleja con el flujo reverso que se origina debido a la oscilación. En la Figura 1.6 puede apreciarse este mecanismo de mezcla dando lugar a un buen mezclado radial en la región entre deflectores. Por otro lado, el flujo oscilatorio es el encargado de controlar el mezclado axial y, a su vez, este se controla mediante la variación de la frecuencia y la amplitud de la oscilación. Por tanto, el mezclado es independiente del flujo neto. La naturaleza del flujo es turbulenta a pesar de que el flujo neto sea laminar. Esta es una de las características de los OBR que los distingue de los mezcladores estáticos en los que la mezcla sí que está afectada por el flujo neto.



Figura 1.6-Caso real a la izquierda y simulación por CFD a la derecha

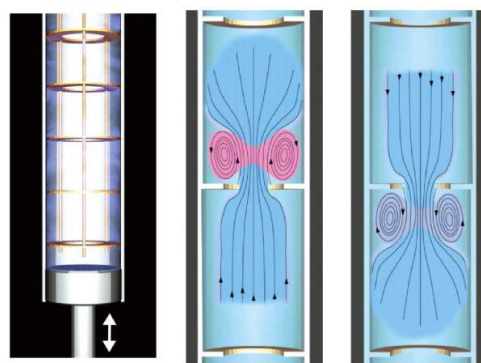


Figura 1.7-Vorticidades generadas por los deflectores con el flujo oscilatorio

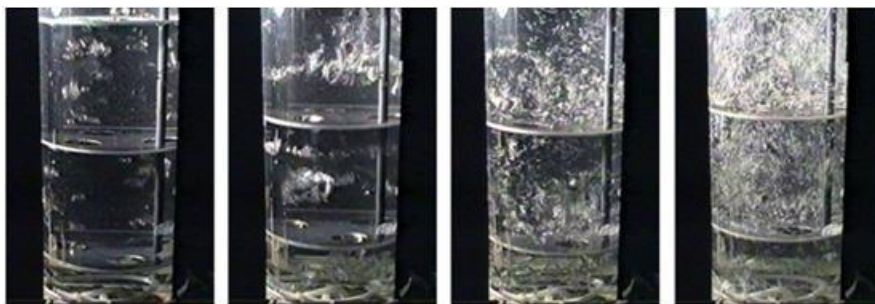


Figura 1.8-Visualización del mecanismo de mezcla. Sin oscilación (a). Comienzo de la oscilación (b). Tras un ciclo completo de oscilación (c). Tras varios ciclos completos de oscilación (d).

En la Figura 1.8 se puede observar los diferentes vórtices de velocidad que se genera al cambiar de sentido la dirección del flujo. Estos vórtices se van generando de forma repetitiva en cada ciclo y paso de tiempo.

1.3. Números adimensionales que caracterizan el flujo

El número adimensional clásico para caracterizar un flujo en un tubo es el conocido **número de Reynolds [4]**, y se define como la relación entre los términos convectivos y los términos viscosos del flujo.

$$Re = \frac{\rho u_{net} D}{\mu}$$

Donde D es el diámetro del tubo, μ la viscosidad dinámica del fluido y u_{net} la velocidad media del flujo.

Cuando el movimiento oscilatorio se superpone sobre el flujo neto, es necesario de otro número adimensional que caracterice el flujo, y éste es el **número de Reynolds oscilatorio**, que se define como:

$$Re_o = \frac{2\pi f x_0 \rho D}{\mu}$$

donde f y x_0 son la frecuencia y la amplitud del movimiento respectivamente y D es el diámetro del conducto.

Otro parámetro importante es el **número de Strouhal**, que se define como:

$$St = \frac{D}{4\pi \cdot x_0}$$

que describe el efecto de la amplitud de la oscilación.

1.4. Características del flujo "Pistón" o "Plug Flow"

Además de los flujos laminar y turbulento, se puede reconocer el flujo pistón como un flujo característico. Para describirlo estudiaremos los diferentes tipos de flujos que se pueden dar en un tubo [5].

En la Figura 1.9 se muestran los perfiles de velocidad para un régimen laminar, turbulento y en flujo pistón.

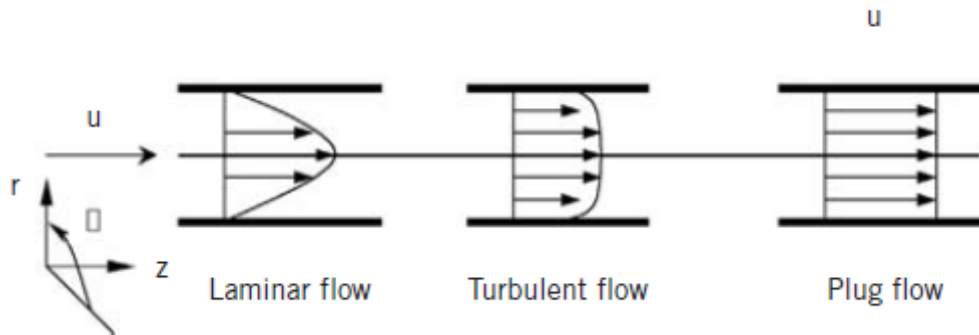


Figura 1.9- Perfil de velocidad en flujo laminar, turbulento y pistón.

En **flujo laminar**, la velocidad en el centro del tubo es igual a la velocidad en la entrada, mientras que la velocidad en la proximidad de las paredes tiende a cero, formándose un perfil de velocidad parabólico. Como consecuencia de este perfil de velocidades el tiempo de residencia de las diferentes partículas en el interior del tubo será diferente.

En el **flujo turbulento**, el perfil de velocidades es más aplanado que en régimen laminar, sin embargo, todavía hay una subcapa laminar en las zonas más próximas a la pared. Para un fluido dado (ρ y μ) y diámetro del tubo (D), el criterio principal que separa el régimen laminar del turbulento es el número de Reynolds Re_n .

En el **flujo pistón** (*plug flow*), todas las componentes de velocidad en el tubo son iguales a la velocidad en la entrada, por lo que no hay gradiente de velocidad en la dirección radial, lo que indica una mezcla completa a través del tubo. Debido al perfil de velocidad, todos los elementos del fluido que viajen a través del recipiente tendrán un tiempo de residencia igual. Esta definición es una idealización del flujo puramente turbulento.

El flujo pistón es un flujo que satisface los siguientes criterios:

- El perfil de velocidad en la dirección del flujo (axial) es plana $u_z = u$
- No hay mezclado en la dirección axial.
- Hay un completo mezclado en la dirección radial.

Fundamentalmente, cualquier sistema de flujo pistón está compuesto por dos componentes esenciales a) una configuración tubular y b) un flujo neto.

1.5. ¿Cómo puede evaluarse el flujo pistón?

El flujo pistón es más fácil de identificar que de definir, y el método más utilizado es el uso de un trazador [5]. En un reactor tubular, un trazador (por ejemplo, $NaCl$ o KNO_2) con una concentración y densidad conocida es inyectado en un punto del reactor. Aguas abajo de la inyección se registra la concentración de trazador en función del tiempo obteniéndose las curvas de concentración en función del tiempo (Figura 1.10).

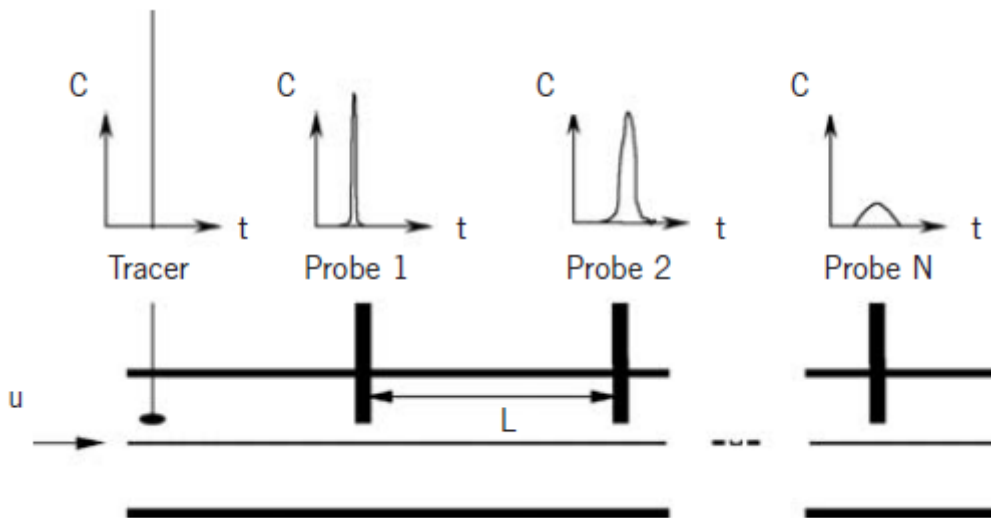


Figura 1.10- Ensayo para medir el flujo pistón

Adimensionalizando estas curvas podemos evaluar la aparición o no del flujo pistón. En la Figura 1.11 se representan distintas curvas adimensionales de tiempo de residencia. Dependiendo de la forma que adoptan las curvas, se puede evaluar el mezclado.

Las diferentes curvas siguen una distribución Gaussiana con mayor o menor desviación típica, y con una media más o menos centrada en $\Theta=1$.

La curva de tiempos de residencia que describiría un plug flow de forma ideal, sería aquella que se encuentra centrada perfectamente en $\Theta=1$ y su desviación típica es mínima.

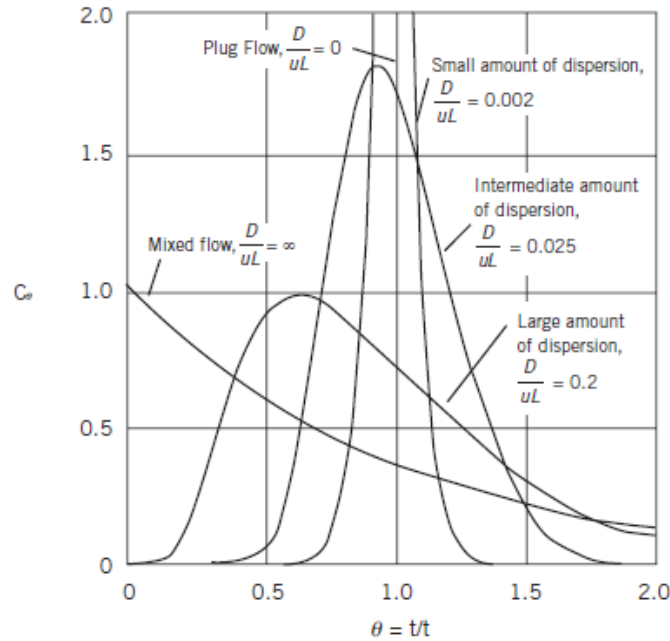


Figura 1.11-Curvas adimensionales para estudiar el tiempo de residencia

1.6. Métodos utilizados para estudiar la bondad del mezclado

Los métodos utilizados para estudiar la bondad del mezclado son muy variados. A continuación se muestra un resumen de los más utilizados para finalmente centrarnos en el método utilizado en este PFC, el de *Distribución de tiempos de residencia*.

1.6.1. Proporción de velocidad axial a transversal

Este método utilizado por **Mikko Manninen y Xiong-Wei Ni [6]** está planteado para analizar la bondad del mezclado en un OBR-MF, aunque en este caso, con un flujo oscilatorio puro. Como se expone en este PFC, para bajos números de Reynolds, el flujo sigue un patrón ordenado y la velocidad transversal es únicamente radial. Sin embargo, al pasar al régimen turbulento aparece una notable componente tangencial y se forman torbellinos irregulares.

La proporción de velocidad axial a transversal tiene en cuenta este efecto y se define cómo:

$$R_v(t) = \frac{\sum_i |u_{i,axial}| \cdot V_i}{\sum_i |u_{i,transversal}| \cdot V_i}$$

donde V_i es el volumen de la celda computacional y la velocidad transversal se define como

$$u_{i,transversal} = \sqrt{u_y^2 + u_z^2}$$

Puesto que $R_v(t)$ depende del tiempo, habrá que realizar un promediado temporal de los valores obtenidos.

El ratio R_v describe el transporte efectivo de la componente axial oscilatoria a la dirección transversal. Instantáneamente, R_v puede tomar valores elevados, por ejemplo cuando se alcanza una alta velocidad en la sección de los deflectores. Sin embargo, la calidad general de la mezcla puede ser buena si R_v toma valores bajos en otros instantes de tiempo.

1.6.2. Tasa de estiramiento y giro

Mackley y Neves-Saraiva [7] [8] emplean este método en su trabajo. Consiste en partir de una disposición inicial de las partículas y definir segmentos entre las mismas con una longitud y orientación iniciales. Posteriormente se estudia el alargamiento y giro de dichos segmentos debido al campo de velocidades. Este estudio se realiza resolviendo las ecuaciones de alargamiento y velocidad de rotación que se muestran a continuación:

$$\begin{aligned}\frac{d(\ln l)}{dt} &= \sin^2 \theta \cdot \frac{\partial v}{\partial y} + \sin \theta \cdot \cos \theta \cdot \left(\frac{\partial v}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial y} \right) + \cos^2 \theta \cdot \frac{\partial u}{\partial x} \\ \frac{d\theta}{dt} &= \sin^2 \theta \cdot \frac{\partial v}{\partial x} + \sin \theta \cdot \cos \theta \cdot \left(\frac{\partial v}{\partial y} - \frac{\partial u}{\partial x} \right) - \sin^2 \theta \cdot \frac{\partial u}{\partial y}\end{aligned}$$

1.6.3. Dispersión axial

Este método también es empleado por **Mikko Manninen y Xiong-Wei, Ni [6]**. El método consiste en inyectar un trazador en cierto punto del OBR y estudiar la dispersión del mismo a lo largo del reactor. Los autores buscan una distribución Gaussiana según la coordenada axial.

Se trabaja con un modelo unidimensional convectivo-difusivo en un conducto para la concentración de especies, C

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D_c \cdot \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} - u_{net} \cdot \frac{\partial C}{\partial x}$$

donde x es la coordenada axial, u_{net} es la velocidad axial media en el conducto y D_c es el coeficiente de dispersión que es una medida del grado de mezclado axial. Este coeficiente de dispersión depende de la frecuencia y amplitud de oscilación así como de la geometría del reactor y de las propiedades del flujo y del fluido.

1.6.4. Distribución de tiempos de residencia (RTD)

Autores como **Anh N. Phan y Adam P. Harvey [9]** han trabajado con este método. De entre los métodos mencionados hasta ahora, RTD va a ser el método empleado en este PFC.

La distribución de tiempos de residencia (RTD: *Residence Time Distribution*) de un reactor químico, es una distribución de probabilidad que describe la cantidad de tiempo que un elemento diferencial de un fluido puede pasar dentro de un reactor. La RTD se utiliza para caracterizar el mezclado y el flujo dentro de un reactor.

La distribución de tiempos de residencia viene representada por una distribución de edad de salida, $E(t)$, que mide el tiempo que las diferentes fracciones de “elemento fluido” permanecen dentro del reactor (macromixing). Esta distribución no da información sobre el mezclado a nivel molecular (micromixing).

La función de edad de salida, $E(t)$, está normalizada y se define matemáticamente:

$$\int_0^{\infty} E(t) dt = 1$$

El tiempo de residencia promedio se calcula con la siguiente ecuación:

$$\tau = \int_0^{\infty} t \cdot E(t) dt$$

Si no hay zonas muertas dentro del reactor, entonces τ será igual al tiempo hidráulico de residencia τ_h , que se obtiene de dividir el volumen del reactor (V) entre el caudal de entrada del fluido (Q).

$$\tau_h = \frac{V}{Q}$$

Otros estadísticos descriptivos pueden proveer información sobre la conducta de la función $E(t)$. Por ejemplo, el segundo momento central, la varianza (σ^2), indica el grado de dispersión respecto de la media.

$$\sigma^2 = \int_0^{\infty} (t - \tau)^2 \cdot E(t) dt$$

El tercer momento central indica el grado de asimetría de la distribución $E(t)$ y el cuarto momento central indica el grado de curtosis presente.

1.7. Determinación de la distribución de tiempos de residencia (RTD)

La curva RTD se mide introduciendo un trazador no reactivo dentro del sistema a una cierta distancia de la entrada. La concentración del trazador va cambiando a lo largo del reactor y su respuesta se encuentra con la medición de la concentración del trazador a la salida (la introducción del trazador no debe modificar las condiciones hidrodinámicas).

Dependiendo del proceso, se pueden utilizar trazadores cuya propiedad a medir es la conductividad, la absorción de la luz, la concentración de un determinado catión, o la radioactividad. Por esto, dependiendo del trazador utilizado, se utilizan diferentes técnicas experimentales. Entre los factores que deben ser considerados para la selección del trazador para una determinada aplicación se puede mencionar:

- Disponibilidad del trazador
- Equipo de detección
- Límite de detección a baja concentración
- Propiedades físicas similares a las del material que se transporta (densidad, viscosidad)
- No debe reaccionar químicamente
- No debe absorberse en las paredes del reactor o en las partículas

En general, la inyección del trazador se hace mediante una función pulso o una función escalón. Es posible usar otras funciones pero se requiere más cálculos para dar sentido a los resultados que da la curva RTD.

Experimento en pulso

Este método requiere la introducción de un volumen muy pequeño de trazador en el interior del reactor, tal que su función se aproxime a la función Delta de Dirac (ver Figura 1.12).

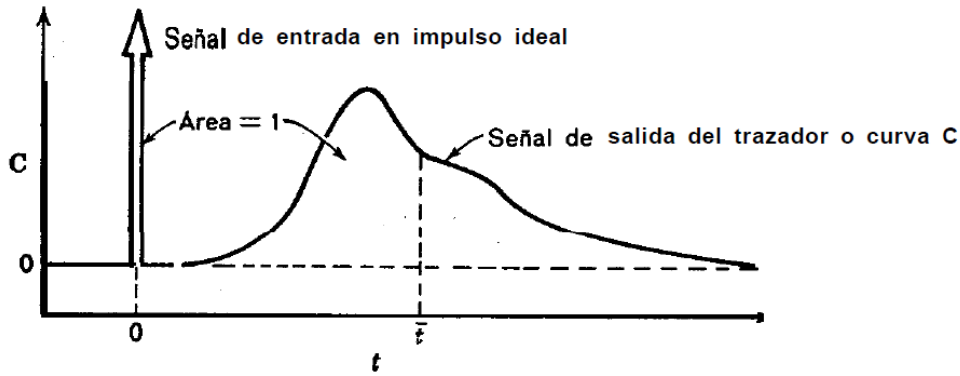


Figura 1.12-Experimento en pulso

Debido a que una función infinitamente corta no puede ser producida, esta suele ser producida de tal modo que sea mucho más pequeña que el tiempo de residencia del recipiente. Si una masa del trazador, M , es introducida dentro del recipiente de volumen V y tiene un tiempo de residencia esperado τ , la función de edad de salida, $E(t)$, toma la forma:

$$E(t) = \frac{C(t)}{\int_0^{\infty} C(t)dt}$$

Donde $C(t)$ se define como la concentración de trazador medida a la salida del reactor con un tiempo de residencia t .

De este modo, para la inyección en pulso, las ecuaciones antes planteadas quedan como:

$$\tau = \int_0^{\infty} t \cdot E(t)dt = \frac{\int_0^{\infty} tC(t)dt}{\int_0^{\infty} C(t)dt}$$

$$\sigma^2 = \int_0^{\infty} (t - \tau)^2 \cdot E(t)dt = \frac{\int_0^{\infty} (t - \tau)^2 C(t)dt}{\int_0^{\infty} C(t)dt}$$

De forma discreta las ecuaciones adimensionales toman la siguiente forma:

Tiempo adimensional

$$\theta = \frac{t_i}{\tau}$$

Tiempo de residencia medio

$$\frac{\sum_i t_i C_i \Delta t_i}{\sum_i C_i \Delta t_i}$$

donde C_i es la concentración de trazador en el tiempo t_i y Δt_i es el intervalo entre dos medidas.

$$E(\theta) = \tau E(t) = \tau \frac{C_i}{\sum_i C_i \Delta t_i}$$

$$\sigma(\theta)^2 = \frac{\sigma(t)^2}{\tau^2} = \frac{\sum_i (t_i - \tau)^2 E(t) \Delta t_i}{\tau^2}$$

La curva de tiempos de residencia (RTD) juega un papel importante en la caracterización de un reactor, ya que refleja las condiciones de mezclado dentro de él. Estas curvas RTD pueden variar desde distribuciones muy estrechas y simétricas donde hay una considerable mezcla en sentido radial (flujo pistón), hasta, en el otro extremo, curvas anchas y asimétricas con largas colas, donde el mezclado radial es pobre.

Una curva estrecha será normalmente preferible para reactores de flujo oscilatorio y por lo tanto una menor varianza será la deseada.

El conocimiento del comportamiento del fluido dentro del reactor es muy importante, porque uno de los factores no controlables al momento de hacer el **escalamiento** de un diseño es la no idealidad del flujo, por tanto el desconocimiento del **patrón de flujo** puede conducir a grandes errores, sin embargo, un completo estudio acerca del flujo sería demasiado complejo. En muchos casos, no es necesario tener tanta información, tan solo es necesario conocer cuánto tiempo permanece cada molécula dentro del recipiente, o lo que es lo mismo, la distribución de tiempos de residencia del fluido.

1.8. Ley de Fick

La ecuación teórica que gobierna la distribución de trazador viene dada por la **Ley de Fick** [5]:

$$\frac{\partial c}{\partial t} = D \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} - U \frac{\partial c}{\partial x}$$

Ecuación en la que se considera el eje 'x' como eje del movimiento y 'C' la concentración del trazador la cual es función del tiempo y la posición $C=C(x,t)$.

'D' es el coeficiente de dispersión longitudinal (no tiene el mismo valor que el coeficiente de dispersión D_c definido anteriormente en el apartado 1.6.3), por tanto el primer término de esta ecuación representa la dispersión del trazador en el flujo principal. Evidentemente la dispersión se produce tanto en la dirección del movimiento general del flujo como en dirección perpendicular a este, pero el orden de magnitud de esta última es bastante inferior al que hay en dirección longitudinal por tanto no se tendrá en cuenta. El segundo miembro es el término convectivo, donde 'U' es la velocidad promedio.

De esta ecuación se desprende que el flujo puede ser de varios tipos:

- 1- Puramente dispersivo.
- 2- Puramente convectivo.
- 3- Mezcla entre dispersión y convección.

Un ejemplo de las curvas que se pueden obtener en el caso dispersivo al inyectar el trazador se muestra en la figura.

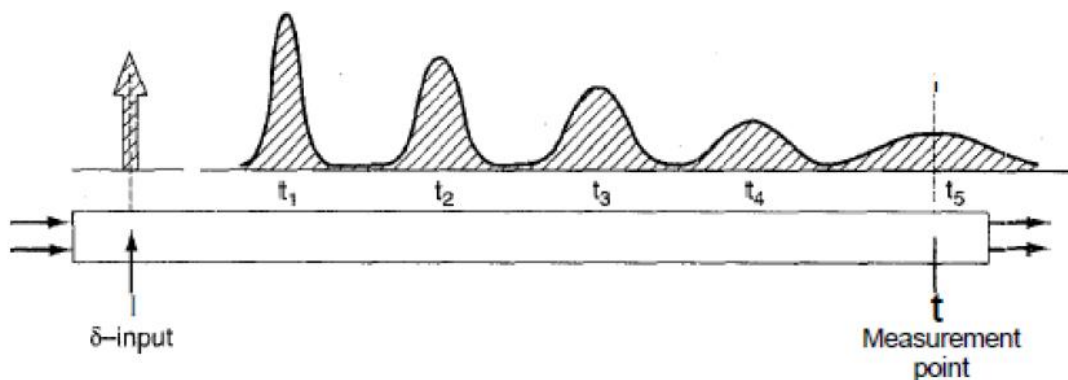


Figura 1.13-Evolución de la concentración del trazador

En la Figura 1.13 se puede observar donde se introduce un diferencial de volumen en un instante de tiempo (δ - input) y qué curvas de fracción másica del trazador se obtienen para diferentes distancias respecto al punto de inyección. Como se aprecia

siguen una distribución Gaussiana y a mayor distancia respecto al punto de inyección se puede ver una mayor dispersión.

1.9. Ventajas, limitaciones y algunas aplicaciones

Los reactores de flujo oscilatorio presentan grandes **ventajas** en comparación con los reactores de agitación tradicionales:

- Tiempo de reacción más corto, debido a un mejor mezclado. Esto permite producir mayores volúmenes de producto en menor tiempo.
- Mejora la transferencia de calor.
- Reduce el consumo de energía y por tanto los costes de funcionamiento.
- Diseño compacto que reduce el espacio necesario para su instalación.
- Velocidades del flujo lentas, al contrario que las grandes velocidades superficiales que necesitan los reactores de agitadores convencionales para realizar el mezclado con eficacia.
- Mayor control de la reacción, modificando las condiciones del flujo oscilatorio y la geometría de los elementos insertados.

También hay que tener en cuenta ciertas **limitaciones**:

- Si en la reacción participa un gas, éste tendrá una capacidad límite en torno al 15% ya que los gases amortiguan la propagación de la oscilación perdiendo efectividad en la mezcla y la reacción.
- La viscosidad, a partir de ciertos valores, puede ser otro problema ya que reduce la eficiencia del mezclado. Una opción sería aumentar la temperatura de trabajo para reducir la viscosidad, aunque esto dependerá de las características de la reacción buscada.

En cuanto a las **aplicaciones** encontramos que estos reactores se utilizan en las industrias química, farmacéutica y bioquímica. Algunas de estas aplicaciones son polimerización, fermentación, síntesis orgánica etc.

Una importante aplicación es la fabricación de polímeros mediante la **polimerización por suspensión**. En este proceso se mezcla una fase acuosa, generalmente agua, con una cierta cantidad de monómero insoluble, dando lugar a la formación de gotas de monómero en la fase acuosa. El *OBR* permite obtener una distribución adecuada y uniforme del tamaño de las partículas de polímero a través del control de las

condiciones de mezcla, especialmente de la temperatura, así como evitar la fusión de las gotas de monómero durante la reacción. Con esta técnica se producen polímeros como el cloruro de polivinilo o el poliestireno.

Una de las aplicaciones más atractivas para los reactores de flujo oscilatorio es la **producción de biocarburantes**. El empleo de reactores tipo tanque de agitación es una tecnología suficientemente conocida, y cuya eficiencia es ya difícilmente mejorable. Por ello se trabaja actualmente en el desarrollo de reactores intensificados: reactores estáticos, reactores con micro-canales, reactores con cavitación, reactores rotativos y reactores de flujo oscilatorio. Estas nuevas tecnologías permitirán aumentar la competitividad de las instalaciones de producción de biodiesel.

1.10. Tubo liso sin diafragmas ($Re_n=230$)

Para demostrar la ventaja que supone un OBR con flujo oscilatorio o diafragmas móviles frente a un reactor de tubo liso sin diafragmas vamos a hacer un estudio del flujo en estas condiciones.

Se inyectará un impulso de trazador en un tubo liso sin diafragmas, con una velocidad uniforme en la entrada (ver Figura 1.14) con un $Re_n=230$.

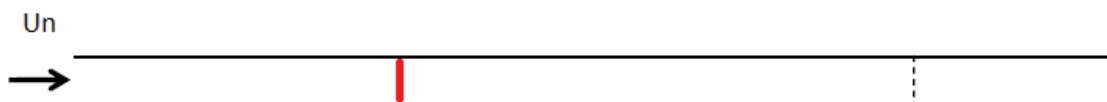


Figura 1.14- Inyección impulso en tubo liso sin diafragmas

En la Figura (1.15) se puede visualizar la velocidad en cada región del tubo así como también el perfil de velocidad en una sección (ver Figura 1.16).

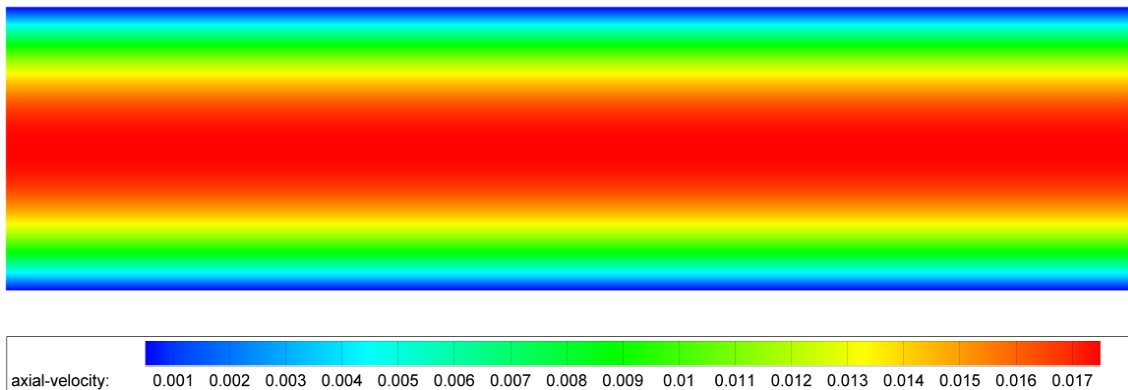


Figura 1.15- Velocidad axial en las regiones del tubo liso sin diafragmas $Re=230$.

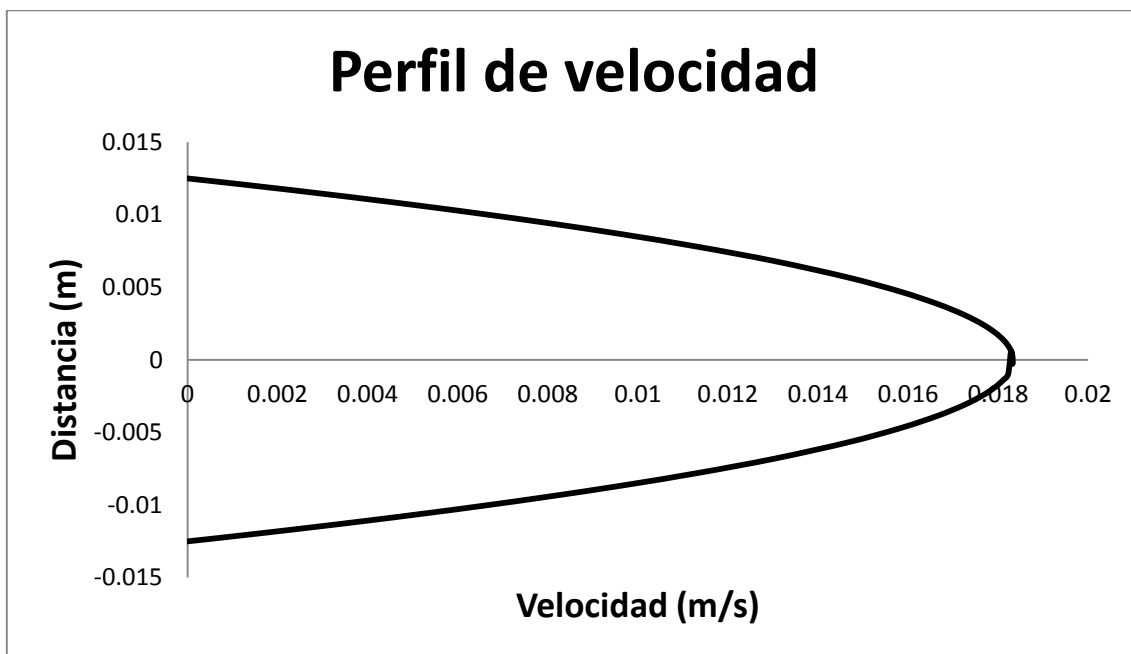


Figura 1.16- Perfil de velocidad en una sección del tubo liso sin diafragmas $Re=230$

El perfil de velocidad de la Figura 1.16 es de tipo parabólico al encontrarnos a bajos regímenes de número de Reynolds. La velocidad del flujo en las proximidades de la pared es nula, mientras que la velocidad en la zona central es máxima. Al inyectar un trazador como se muestra en la Figura (1.17), éste se desplaza con una velocidad diferente dependiendo de la zona en la que se encuentre. Las partículas más próximas a la pared, se moverán con una velocidad inferior que las que se encuentran en la zona central. Esto provoca tiempos de residencia muy amplios, obteniendo curvas RTD anchas, asimétricas y con largas colas.

Lo conveniente es que toda la especie inyectada se desplazara con una misma velocidad, para que de este modo el tiempo de residencia en el interior del reactor fuera el mismo.

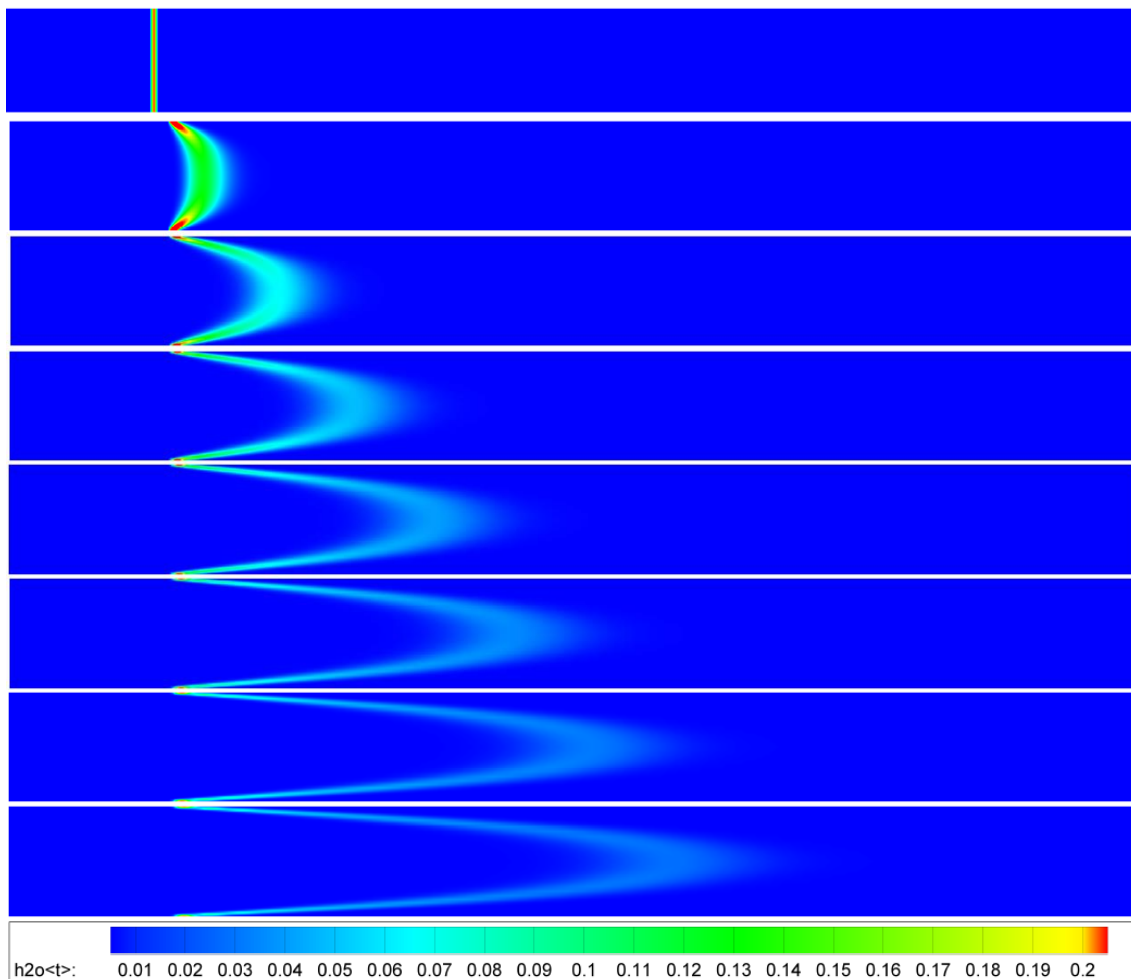


Figura 1.17- Inyección de trazador en un tubo liso sin diafragmas $Re=230$

1.11. Tubo liso sin diafragmas ($Re_n=10000$)

Ahora pasamos a estudiar cómo se comporta el transporte de un trazador en un tubo liso sin diafragmas, pero con alto número de Reynolds ($Re_n=10000$), encontrándonos por tanto en un régimen turbulento.

Para altos número de Reynolds (régimen turbulento), el perfil de velocidad que se obtiene en una sección es más plano (ver Figura 1.19), que en régimen laminar. Esto permitiría que el tiempo de residencia de las partículas inyectadas fuera casi el mismo, pero a costa de necesitar tubos muy largos, ya que al aumentar el caudal necesitamos más longitud de tubo para conseguir el tiempo necesario para que se alcance la reacción.

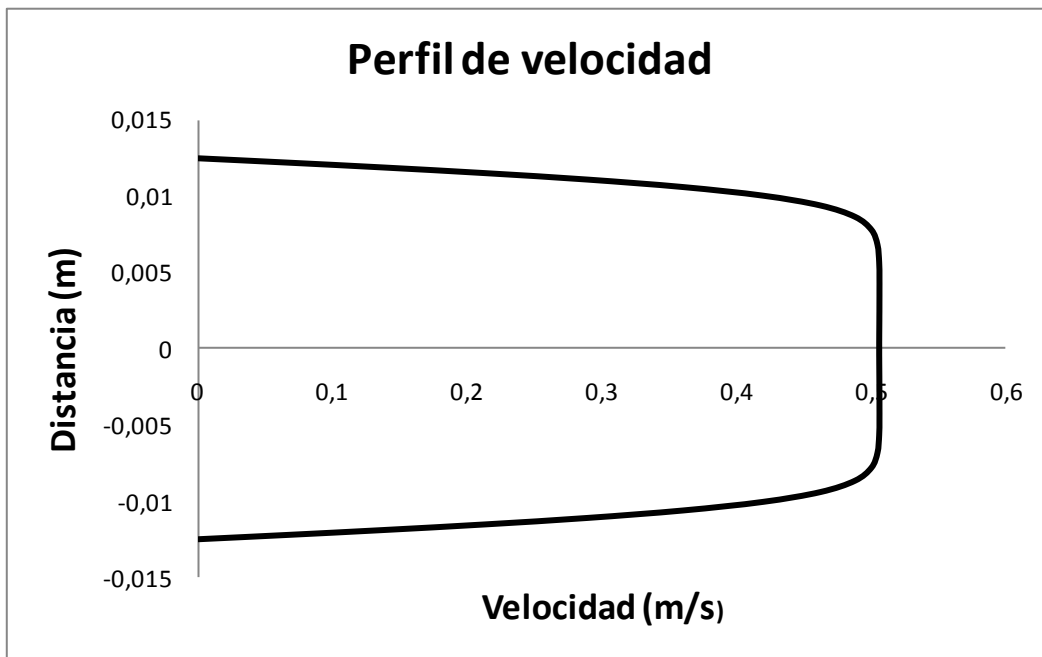
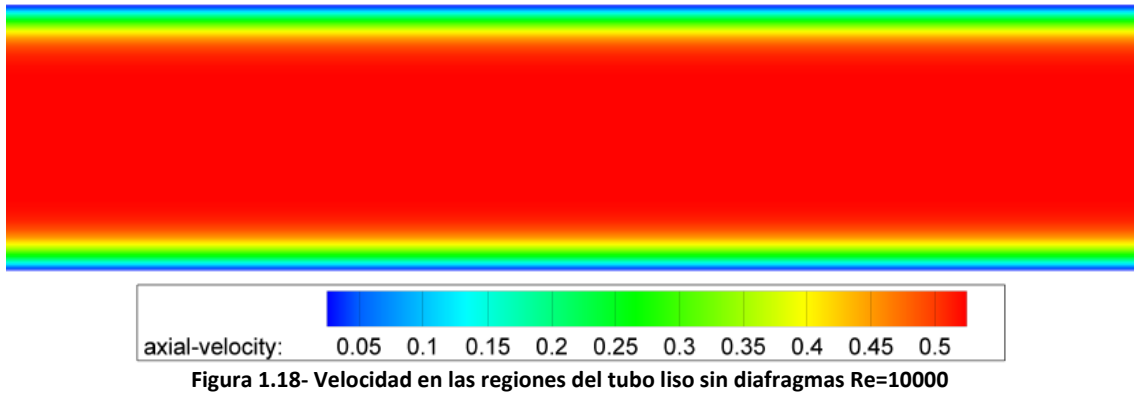


Figura 1.19- Perfil de velocidad en una sección del tubo liso sin diafragmas $Re=10000$

En la Figura 1.20 se muestra cómo se transporta el trazador inyectado en un tubo liso con un alto número de Reynolds ($Re_n=10000$), y por lo tanto en régimen turbulento. La especie avanza según un frente plano sin mezclado radial, en las zonas más próximas a la pared aparece el fenómeno de la capa límite en el que la especie avanza con más lentitud.

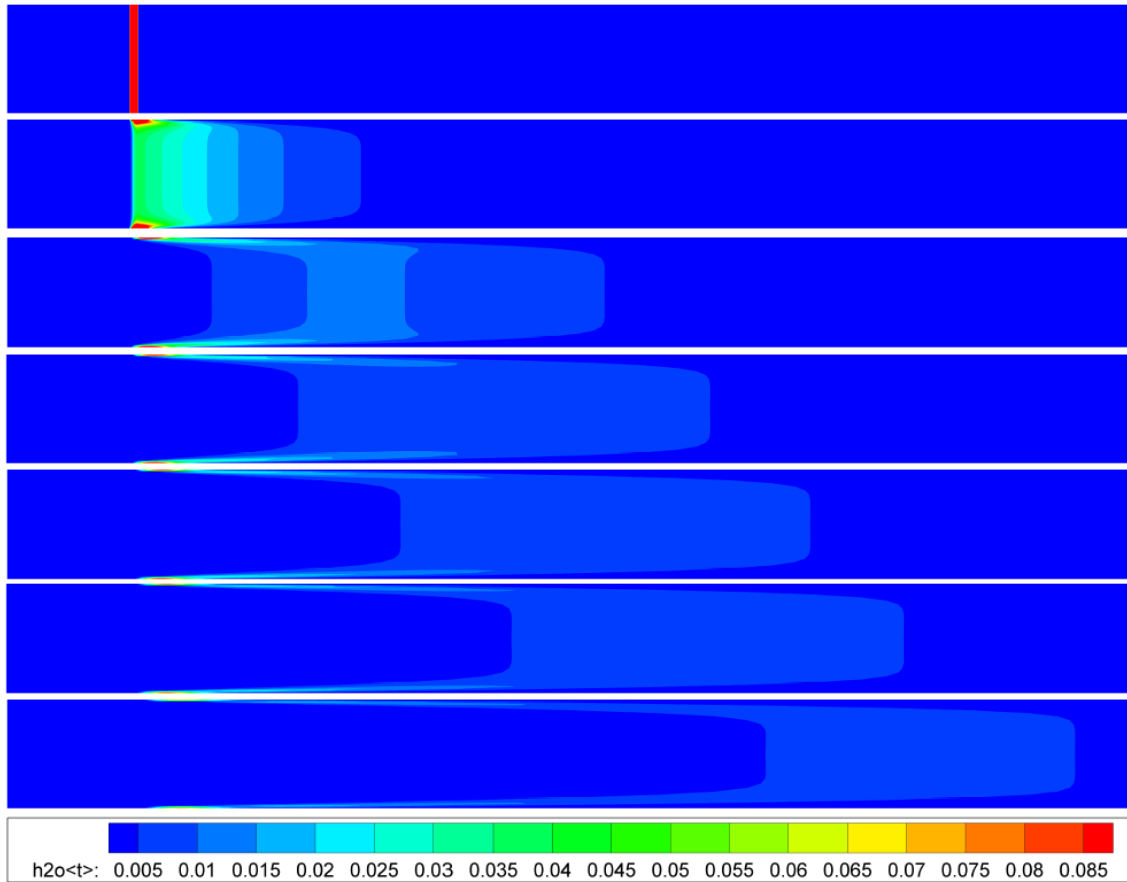


Figura 1.20- Inyección de trazador en un tubo liso sin diafragmas $Re=10000$

1.12. Objetivos

Los objetivos que se plantean para este proyecto son:

- Desarrollar un modelo numérico **2D axisimétrico** en Fluent, destinado a resolver el problema de inyección de trazadores en reactores de flujo oscilatorio (mezcladores tubulares) de geometría clásica.
- Implementar la condición de contorno de oscilación "**normal**" (Normal oscillatory conditions) y "**anormal**" (Abnormal oscillatory conditions) del gasto másico en el modelo desarrollado en el punto a)
- Evaluar la distribución del tiempo de residencia en mezcladores tubulares con condiciones oscilatorias **normales** y **anormales**.

- d) Modelizar en Fluent la inyección de trazadores en mezcladores tubulares de **placas oscilatorias** con la metodología de **Moving Reference Frame** y **Malla Deformable**.
- e) Evaluar la distribución del tiempo de residencia en mezcladores tubulares de placas oscilatorias y comparar si la metodología Moving Reference Frame y Malla Deformable son equivalentes.
- f) Comparar la distribución de tiempo de residencia en los dos reactores estudiados; OBR-MB (moving baffles) y OBR-MF (moving fluid)

1.13. Definición del problema

Los reactores de flujo oscilatorio (OBR) son equipos tubulares aptos para el mezclado intensivo, en los que se superpone un flujo neto y un flujo oscilatorio. Los tubos contienen elementos insertados que promueven el mezclado radial -típicamente coronas circulares- y que proporcionan características de flujo pistón (*plug flow*) a la vez que se alcanzan tiempos de residencia muy altos.

La ventaja que supone el flujo pistón, frente a un flujo laminar, está presente en el tiempo de residencia de las sustancias a reaccionar. Un flujo laminar con bajo número de Reynolds, supone un perfil de velocidades parabólico, implicando que las partículas que estén más próximas a la pared viajarán más lentas que aquellas que se encuentren en la zona central. Tiempos de residencia distintos para diferentes partículas puede suponer la creación de productos secundarios no deseados en la reacción, así como también partes fluidas que no tengan suficiente tiempo para reaccionar.

Una solución que podría ser planteada sería aumentar el número de Reynolds, para de este modo, conseguir un perfil más plano típico en régimen turbulento, pero esto implicaría tubos muy largos para satisfacer un tiempo mínimo necesario para que se produzca la reacción.

Todo lo expuesto anteriormente motiva el estudio de un OBR con diferentes tipologías para alcanzar un flujo con características de flujo pistón (*plug flow*).

En este trabajo se presenta el estudio CFD del proceso de mezclado de un OBR con deflectores fijos (OBR-MF) y deflectores móviles (OBR-MB). El proceso de mezclado se va a estudiar mediante la inyección instantánea de un pequeño volumen de trazador. La distribución de dicho trazador se analizará en función del tiempo en una posición axial determinada, tal y como se hace en el ensayo experimental en pulso.

Capítulo 2 : Metodología de simulación numérica

2.1. Transporte de especies en Fluent

En este capítulo se va a comentar qué ajustes hay que realizar en Fluent [10] para conseguir simular el ensayo de transporte de especies.

2.1.1. Definición de la zona de inyección en Gambit

No vamos a entrar en profundidad en el Preprocesado (Gambit) [11], ya que la generación de la geometría y el mallado queda explicado en otros PFC anteriores [12], pero sí es importante mencionar cómo crear un paso del reactor que contenga un volumen para la posterior inyección de un trazador.

Se ha decidido que el trazador se inyectará en el orificio del deflector (otra posibilidad sería inyectarlo entre dos diafragmas). Para definir esta zona se hará uso de Gambit una vez que ya esté definida la geometría y la malla (ver Figura 2.1).

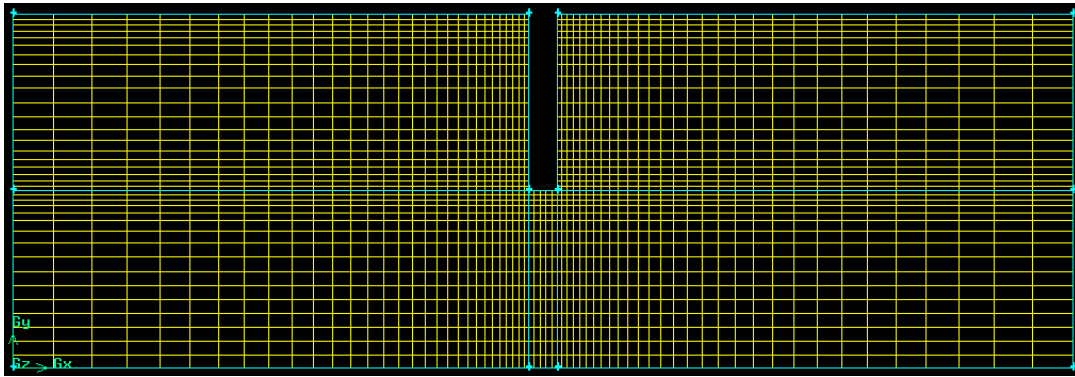


Figura 2.1-Mallado de un paso del reactor creado en Gambit.

Una vez creado un paso del reactor, sólo tenemos que indicar donde se encontrará la zona en la que se inyectará la especie. Para ello utilizaremos el menú **Operation > Zones > Specify Continuum Types**.

- Seleccionaremos la pestaña Add para añadir.
- Pondremos el nombre de la especie, en nuestro caso "trazador".
- El tipo será Fluid.
- Seleccionaremos en Entity la zona en la que será inyectada.

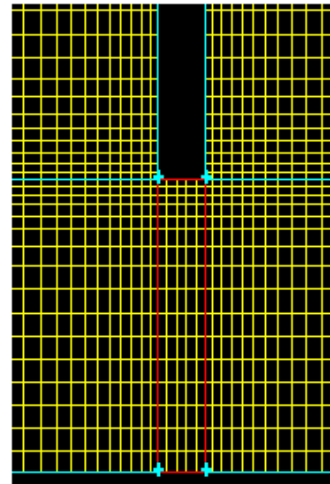
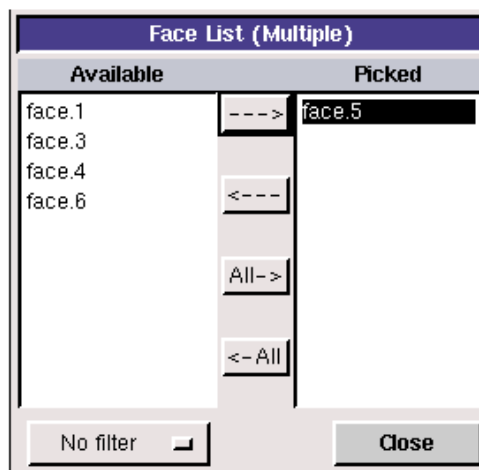


Figura 2.2-Selección de la zona en la que será inyectada la especie.

Y finalmente se debe exportar el archivo como un archivo mesh, para ser reconocido por Fluent. **File > Export (Export 2-D(X-Y) Mesh)**

2.1.2. Importación a Fluent y creación del reactor

Una vez que ya se ha realizado el modelo geométrico de un paso del reactor y lo hemos mallado en Gambit pasará a explicar cómo se importa la malla a Fluent y cómo diseñamos el reactor completo [13].

Para importar la malla **File > Import > GAMBIT** y seleccionamos el archivo (.msh).

Nuestro reactor estará formado por una serie de pasos dependiendo de la longitud de éste, por lo que el primer paso será ir pegando pasos hasta conseguir la geometría deseada. Para ello hay que ir desplazando las mallas ya cargadas en Fluent, pues éste carga las nuevas mallas con las mismas coordenadas que fueron creadas en Gambit, es decir, para nuestro caso creadas con origen en el punto (0, 0, 0).

Desplazaremos la malla de modo que al cargar la nueva tengan una cara coincidente (Figura 2.3).

Grid > Translate

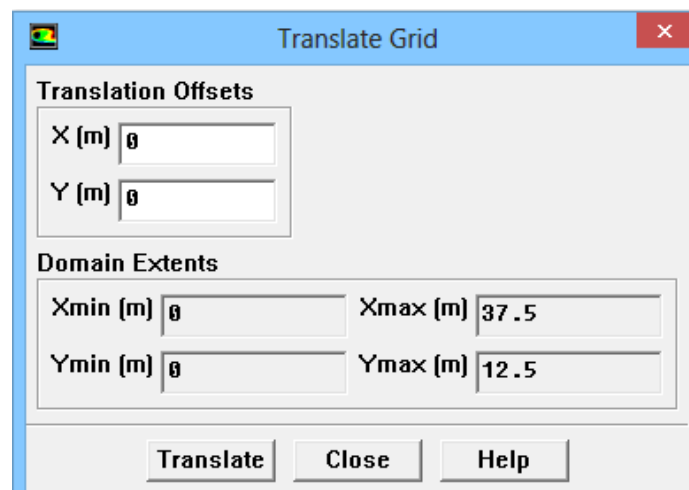


Figura 2.3-Translate Grid

En este caso la ventana nos informa de que nuestro modelo tiene una longitud de 37.5m y anchura de 12.5m estando centrado en (0,0). Por lo que tendremos que trasladar la malla 37.5m hacia la derecha, para ello escribiremos en *Translation Offsets* X=37.5m y pulsar el *Translate*.

Nota: Trabajaremos con longitudes en metros y posteriormente lo escalaremos a milímetros.

Una vez desplazada la malla introduciremos un nuevo paso: **Grid > Zone > Append Case File**

A continuación tendremos que ir uniendo las diferentes caras coincidentes de las mallas que hemos ido cargando para que Fluent considere que tenemos un único caso sin discontinuidades. Para ello utilizamos la herramienta Fuse, donde indicamos las dos secciones, coincidentes que queremos unir.

Grid > Fuse

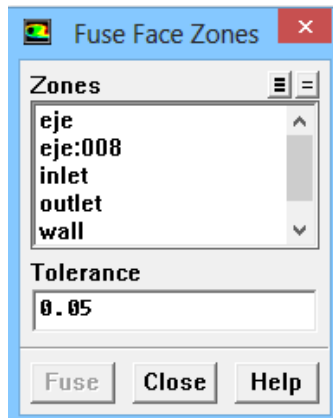


Figura 2.4-Fuse Face Zones

Para saber qué zonas tenemos que fusionar podremos hacer uso de la opción **Display > Grid** y buscar que superficies tienen que unirse.

Deberemos seguir estos pasos hasta conseguir el reactor con la longitud adecuada.

Por defecto, Fluent carga la malla en metros, por lo que tenemos que indicar la unidad en la que fue creada la malla, para tener la escala adecuada. En nuestro caso milímetros.

Grid > Scale

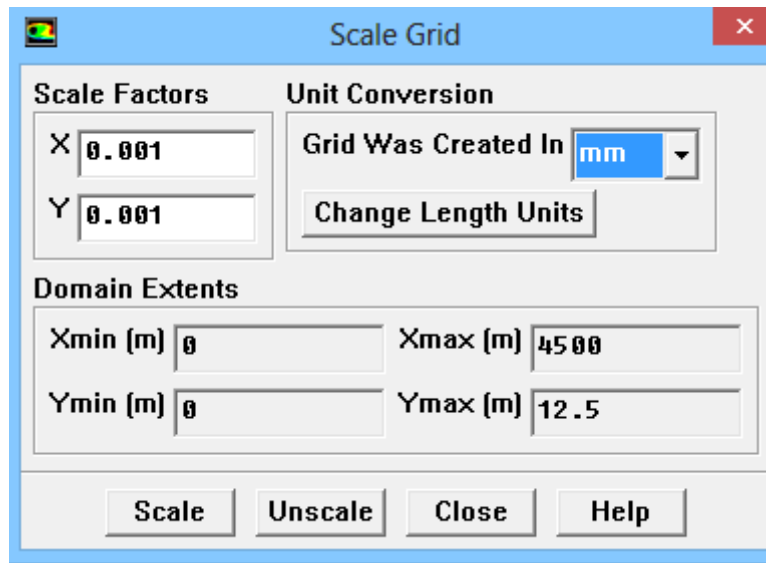


Figura 2.5-Scale Grid

Seleccionando **mm** en *Grid Was Created In* y pulsando a *Scale* nuestro modelo tendrá tamaño en milímetros.

Por último guardamos el caso que hemos creado en **File > Write > Case**.

2.1.3. Modelado del transporte de especies

A continuación se configurará en Fluent las opciones necesarias para modelar el caso de estudio de transporte de especies.

Define > Models > Species > Transport & Reaction

Despliega la ventana siguiente:

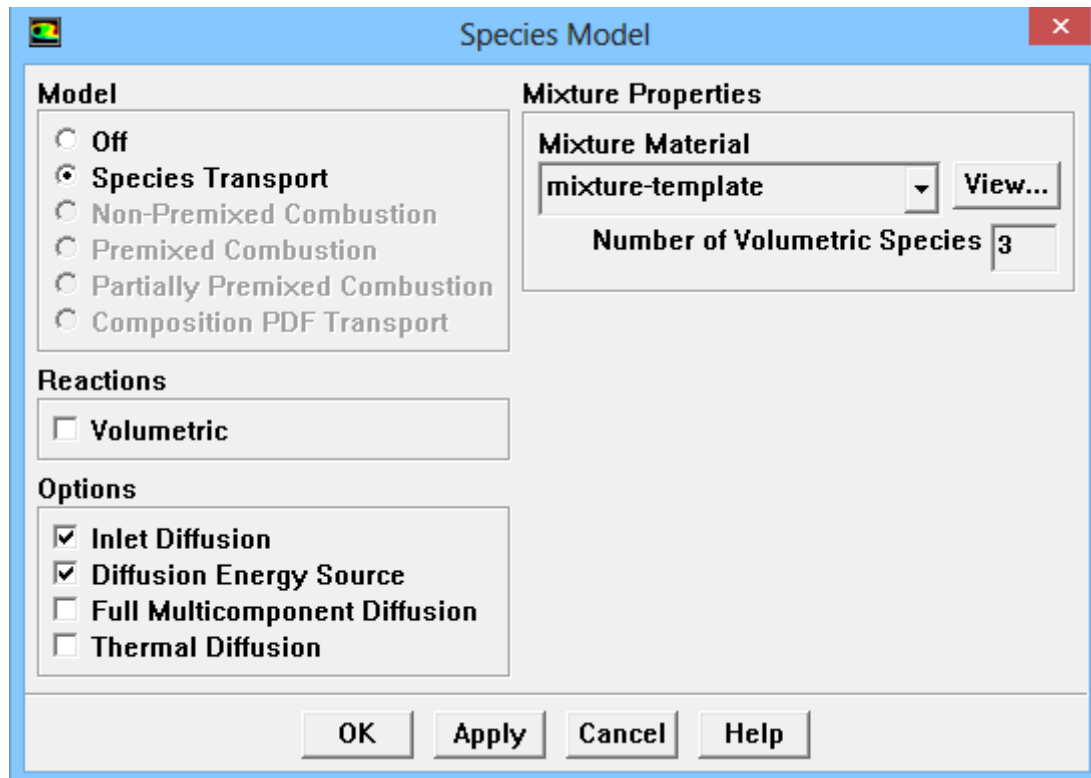


Figura 2.6-Definición del modelo *Transporte de especies*.

1. Se ha de seleccionar en el recuadro **Model** la opción *Species Transport*.
2. No habrá reacciones ya que tanto el fluido principal como el trazador serán agua líquida, por lo que en el recuadro **Reactions** no se marcará la pestaña *Volumetric*.
3. En el recuadro **Options** se ha de marcar *Inlet Diffusion* para simular una difusión molecular ya desde la entrada del fluido. También se activará la opción *Diffusion Energy Source*.
4. Tras pulsar en **Apply** saldrá una ventana que informa de que hay nuevas opciones y materiales disponibles.

Ahora estamos en disposición de definir los dos fluidos que van a participar en el caso: flujo principal y trazador, mediante la opción **Materials**.

1. **Define > Materials**

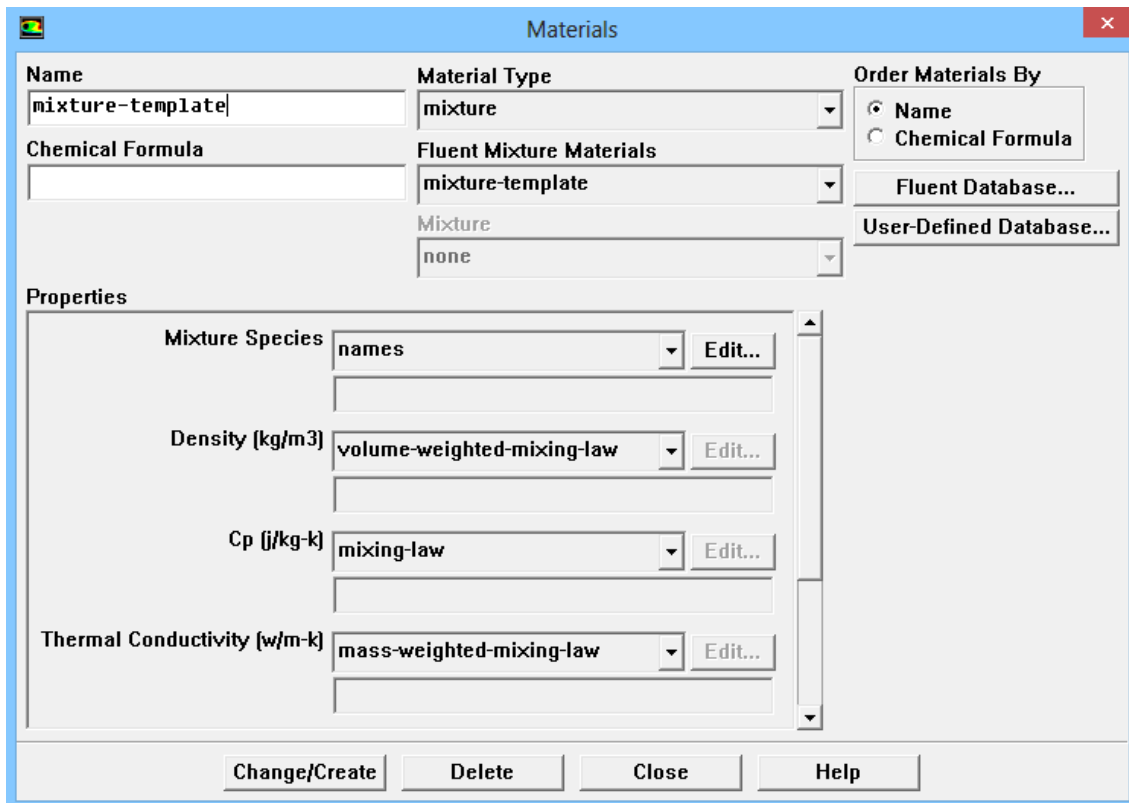


Figura 2.7-Definición de las propiedades y del tipo de material fluido

2. Ahora se ha de añadir el agua desde *Fluent Database*, pinchando en ese botón se desplegará otra ventana donde se buscará **water-liquid (h2o <l>)**

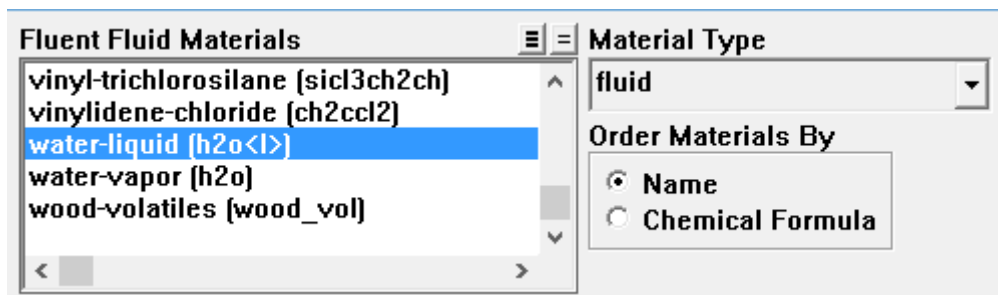


Figura 2.8-Selección para copiar las propiedades del material.

3. Pulsa en **Copy** para copiar las propiedades del material a la ventana anterior.

Las propiedades que debe poseer el fluido serán las siguientes:

The screenshot shows the 'Define Material Properties' dialog box. The 'Name' field contains 'water-liquid' and the 'Chemical Formula' field contains 'h2o<l>'. The 'Material Type' is set to 'fluid'. The 'Order Materials By' section has 'Name' selected. The 'Properties' section shows 'Density (kg/m3)' as 'constant' with a value of '998.2', 'Cp (J/kg-K)' as 'constant' with a value of '4182', 'Thermal Conductivity (W/m-K)' as 'constant' with a value of '0.6', and 'Viscosity (kg/m-s)' as 'constant' with a value of '0.001003'. At the bottom are buttons for 'Change/Create', 'Delete', 'Close', and 'Help'.

Figura 2.9- Definición del material.

4. Una vez definidas estas propiedades, las cuales vienen por defecto, se hace clic en **Change/Create**.

De este modo ya hemos creado el fluido principal el cual será **water-liquid h2o<l>**.

Ya definido el fluido principal pasaremos ahora a definir el trazador, lo cual simplemente se realiza modificando el nombre del fluido principal definido anteriormente como agua por el nombre trazador.

Para ello realizaremos el paso 2) y 3) y aparecerá la siguiente ventana en la que escribiremos lo siguiente:

The screenshot shows the 'New Material Name' dialog box. It displays an error message: 'Material with same name and formula exists. Please choose another name and formula.' The 'New Name' field contains 'trazador' and the 'New Formula' field contains 'h2o<t>'. At the bottom are buttons for 'OK', 'Cancel', and 'Help'.

Figura 2.10-Definición del trazador

y finalmente realizamos el paso 4).

Tras estos pasos ya hemos definido los dos materiales que necesitamos en nuestro modelo: **water liquid h2o<l>** y **trazador h2o<t>**. Se trata en los dos casos de agua líquida, pero Fluent los diferencia al tener diferente nombre.

5. Pasamos ahora a incorporar estos dos materiales a el modelo de transporte de especies. Para ello accedemos a **Define > Models > Species > Transport & Reaction** pulsamos en **Edit** y posteriormente en *Mixture Species* otra vez **Edit**.

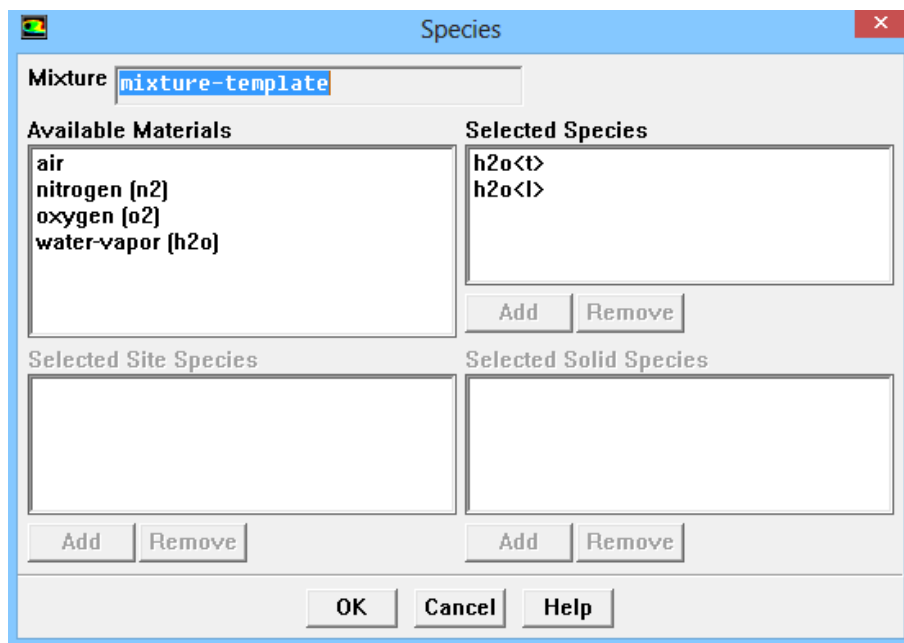


Figura 2.11-Selección del agua y el trazador.

Incorporamos a *Selected Species* **h2o<t>** y **h2o<l>** que son las dos especies que anteriormente hemos definido y que van a ser las de nuestro modelo y posteriormente pulsamos en **OK**.

6. Se cerrará la ventana pero aun continuará abierta la ventana *Material*. En esta ventana deberemos seleccionar las siguientes opciones:

- *Mixture Species*: Deberán estar seleccionadas las dos especies (este paso ya lo hemos realizado anteriormente)
- *Density*: Volume-weighted-mixing-law
- *Cp*: Mlxing-law
- *Termal Conductivity*: Mass-weighted-mixing-law
- *Viscosity*: Mass-weighted-mixing-law

- *Mass Diffusivity*: Constant-dilute-appx 2.288e-09 (coeficiente de difusividad agua-agua)

7. Hacemos clic en **Change**, **Aply** y finalmente **Ok**.

Nuestro modelo ya dispondrá de los dos fluidos necesarios para el transporte de especies.

2.2. Ajustes

A continuación se van a comentar algunos ajustes que se deben aplicar al modelo para resolver los problemas planteados en este PFC:

2.2.1. Modelo

En un reactor de flujo oscilatorio con deflectores, teóricamente, debido a la vorticidad producida por la acción del flujo oscilatorio sobre los deflectores se tendrá un flujo turbulento.

Sin embargo, debido a las limitaciones de potencia de cálculo y cuestiones de convergencia, finalmente se ha decidido resolver los casos utilizando el **modelo Laminar**.

En Fluent, el modelo Laminar es el que viene activado por defecto.

Define > Models > Viscous > Laminar.

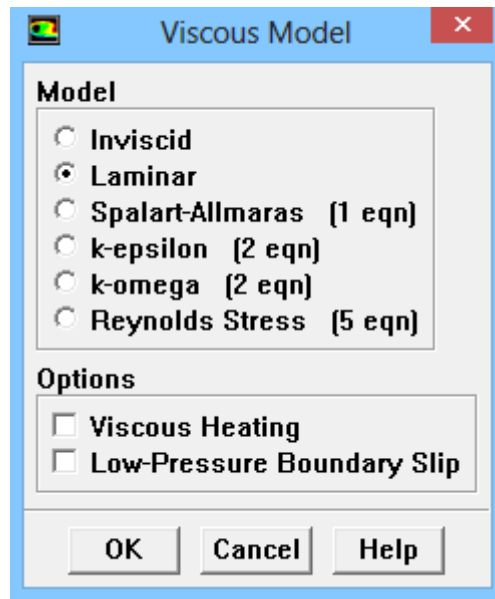


Figura 2.12-Definición del modelo Laminar

2.2.2. Residuos

Los residuos son una herramienta importante a la hora de controlar la convergencia durante el proceso iterativo. Éstos, de modo general, representan la diferencia entre los valores de las variables a resolver entre dos iteraciones. Si un problema converge, estas diferencias tienden a reducirse hasta alcanzar un valor muy pequeño en el que se estabilizan.

Para el proyecto se ha considerado unos residuos del orden de 10^{-4} , con una precisión suficiente teniendo en cuenta la potencia computacional de cálculo de la que disponemos.

Para configurarlos: **Solve > Monitors > Residuals**

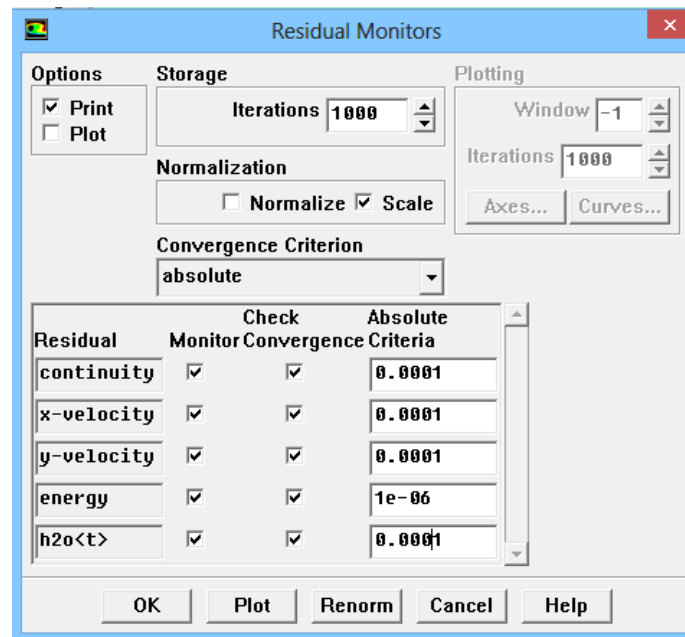


Figura 2.13-Configuración de los residuos

2.2.3. Evaluación de las magnitudes fluidas

Después de cada iteración o paso temporal, se pueden calcular y monitorizar los valores de las magnitudes fluidas sobre un **plano** del dominio computacional, de modo que se pueda observar la evolución de éstas durante el proceso iterativo.

Para obtener valores de dichas magnitudes se pueden emplear distintas técnicas de cálculo:

- **Area:** calcula el valor del área asociada a la superficie a evaluar.

$$\int dA = \sum_{i=1}^n |A_i|$$

- **Integral:** integra el valor de la magnitud seleccionada sobre una superficie.

$$\int \phi dA = \sum_{i=1}^n \phi_i |A_i|$$

- **Area-Weighed Average:** calcula la media de la magnitud ponderándola con el área de las distintas celdas que constituyen la superficie.

$$\frac{1}{A} \int \phi dA = \frac{1}{A} \sum_{i=1}^n \phi_i |A_i|$$

- **Flow Rate:** calcula el flujo de la magnitud a través de la superficie.

$$\int \phi \rho \vec{v} \cdot d\vec{A} = \sum_{i=1}^n \phi_i \rho_i \vec{v}_i \cdot \vec{A}_i$$

- **Mass Flow Rate:** calcula el flujo másico de la magnitud a través de la superficie.

$$\int \rho \vec{v} \cdot d\vec{A} = \sum_{i=1}^n \rho_i \vec{v}_i \cdot \vec{A}_i$$

- **Mass-Weighted Average:** calcula la media de la magnitud a través de la superficie.

$$\frac{\int \phi \rho |\vec{v} \cdot d\vec{A}|}{\int \rho |\vec{v} \cdot d\vec{A}|} = \frac{\sum_{i=1}^n \phi_i \rho_i |\vec{v}_i \cdot \vec{A}_i|}{\sum_{i=1}^n \rho_i |\vec{v}_i \cdot \vec{A}_i|}$$

- **Sum:** calcula la suma de los valores de una magnitud sobre una superficie, ponderándola con el gasto másico que atraviesa cada una de las celdas que componen la superficie.

$$\sum_{i=1}^n \phi_i$$

- **Facet Average:** calcula el valor medio de los valores de la magnitud en las celdas que conforman la superficie.

$$\frac{\sum_{i=1}^n \phi_i}{n}$$

- **Facet Minimum:** calcula el mínimo valor de los valores de la magnitud en las celdas de la superficie.

- **Vertex Average:** calcula el valor medio de los valores de la magnitud en los nodos que conforman la superficie.

$$\frac{\sum_{i=1}^n \phi_i}{n}$$

- **Vertex Maximun:** calcula el máximo valor de los valores de la magnitud en los nodos de la superficie.

Para ello deberemos seguir los siguientes pasos:

Solve > Monitors > Surface

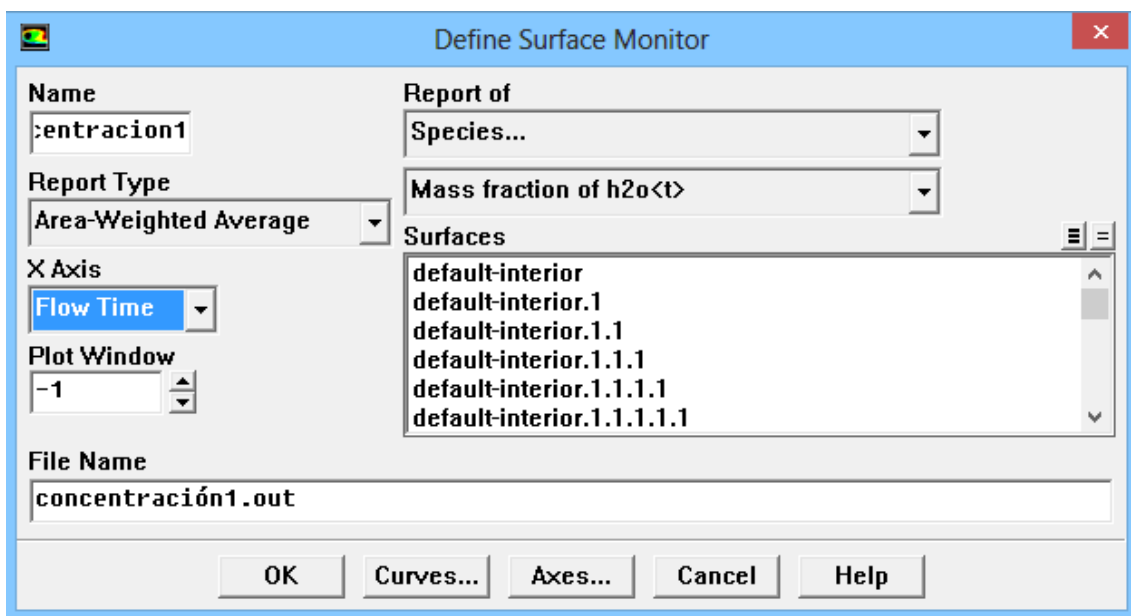


Figura 2.14-Define Surface Monitor

La variable que se estudiará es la fracción másica de trazador.

$$\phi = \frac{m_{trazador}}{m_{total}}$$

Por lo que deberemos seleccionar **Report of Species Mass fraction of h2o<t>**.

Seleccionamos **X axis Flow Time** para conocer la concentración del trazador a lo largo del tiempo de simulación.

En este PFC vamos a hacer uso de dos tipos de reporte.

- **Area-Weighted Average** nos permitirá determinar la fracción másica que hay sobre el plano de evaluación en cada momento. Este cálculo se lleva a cabo dividiendo el sumatorio del producto del campo seleccionado y el área de cada celda por el área total de superficie.
- **Flow Rate** permite conocer la cantidad de trazador que pasa a través de la sección estudiada. Este cálculo se lleva a cabo con el sumatorio del producto de la densidad y el campo seleccionado con el producto escalar del vector superficie de la sección y el vector velocidad en la celda.

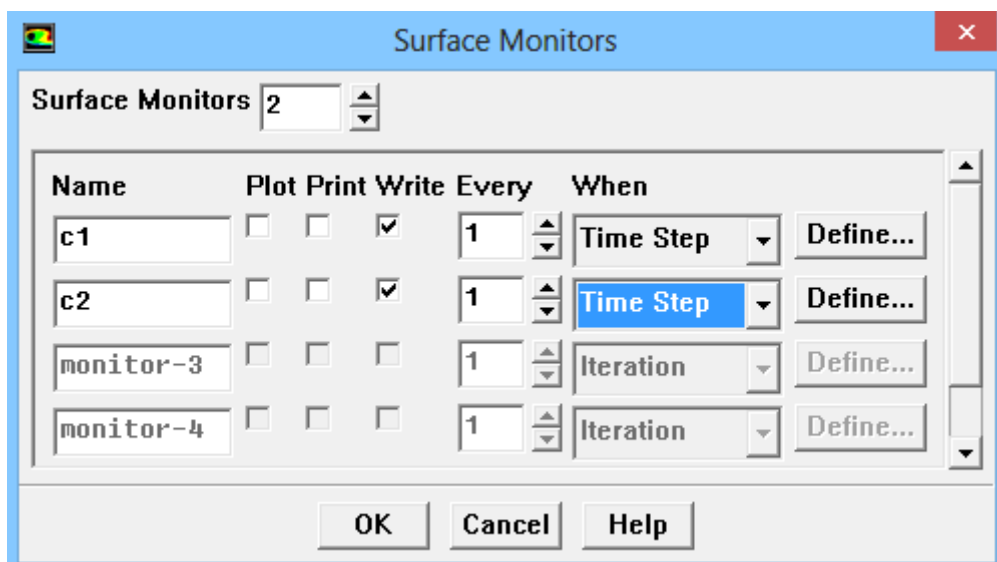


Figura 2.15-Surface Monitors

Deberemos seleccionar que se evalúe en cada paso de tiempo (*time step*). De esta forma el programa generará un documento .out que podremos abrir con Matlab y realizar un Postproceso del problema.

2.2.4. Paso de tiempo.

Para las simulaciones utilizaremos un *Solver Unsteady* para ello deberemos acceder a:
Define > Model > Solver

Seleccionamos **Time Unsteady** y **Unsteady Formulation 2nd-Order Implicit**.

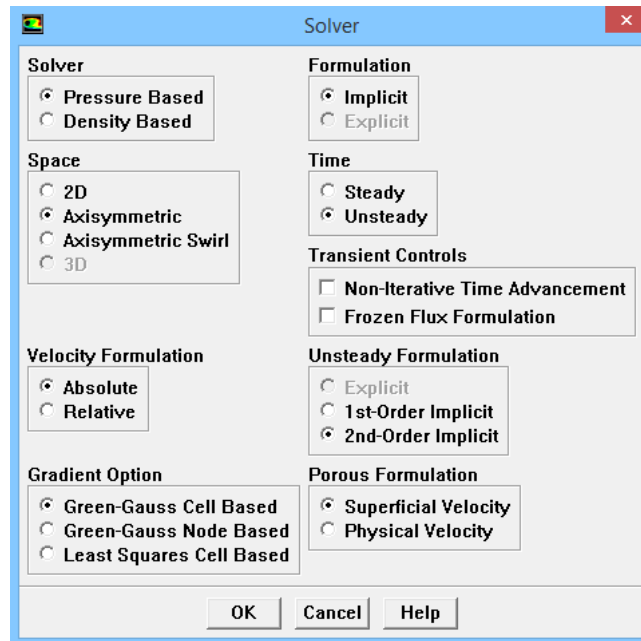


Figura 2.16- Definición del Solver

Ahora ya estamos en disposición de configurar el paso de tiempo mediante el menú **Solve > Iterate**

En este apartado cabe destacar que es importante estudiar y resolver los instantes de tiempo en los que el movimiento oscilatorio tenga los ángulos 0, 45, 90, 145, 180, 225, 270, 315 y 360 grados. Por ser los puntos con flujo neto mínimo, máximo e intermedio entre estos dos últimos.

Muchos autores hacen uso del número de *Courant* para calcular el paso de tiempo necesario en sus simulaciones.

El número de *Courant* unidimensional se define como:

$$C_t = \frac{u\Delta t}{\Delta x}$$

Donde:

u : velocidad (m/s)

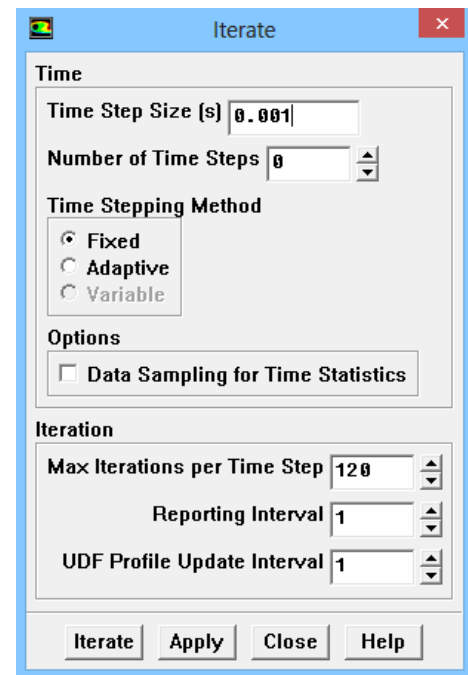


Figura 2.17- Configuración del paso de tiempo

Δt : paso de tiempo (s)

Δx : paso espacial (m)

Para el caso n-dimensional tenemos

$$C_t = \Delta t \sum_{i=1}^n \frac{u_{x_i}}{\Delta x_i}$$

El intervalo espacial no tiene por qué ser el mismo para cada variable espacial.

Una explicación física del número de *Courant*, para una simulación de CFD, es que éste nos informa sobre cómo se mueve el fluido a través de las celdas computacionales. Si el número de *Courant* es ≤ 1 , las partículas fluidas se mueven de una celda a otra contigua en un paso de tiempo (como mucho). Si por el contrario es > 1 , una partícula fluida se mueve a través de dos o más celdas en cada paso de tiempo, pudiendo afectar negativamente a la convergencia.

Se plantean dos razones por la cuales no se ha tenido en cuenta el número de *Courant* para el cálculo del paso de tiempo:

-Fluent utiliza un *solver implícito*, por lo que hasta para grandes números de Courant puede no tener problemas con la convergencia. Al utilizar pasos de tiempo más grandes solo se necesitarán más iteraciones por paso de tiempo para llegar a la solución deseada. Esto se ha corroborado realizando simulaciones con diferente número de pasos de tiempo por ciclo, obteniendo en todos los casos prácticamente el mismo resultado sin tener problemas de convergencia en ningún momento.

-Se observa que la cantidad del número de pasos de tiempo por ciclo necesarios, siguiendo el criterio de Courant, es muy grande. Esto conlleva un coste computacional muy grande. Debido a las limitaciones de potencia de cálculo que se han tenido, se ha optado por un paso de tiempo mayor.

2.2.5. Condiciones de contorno

Las condiciones de contorno son condiciones aplicadas en los límites o fronteras del dominio computacional, son necesarias para poder cerrar el sistema de ecuaciones de gobierno y resolver el problema en cuestión.

En este apartado se realiza una revisión de las diferentes condiciones de contorno que se pueden implementar con Fluent, distinguiendo entre aquellas que se aplican en

zonas de entrada o salida del flujo y aquellas en las que no hay entrada o salida de flujo.

Fluent permite seleccionar entre 10 condiciones de contorno distintas para las zonas de entrada o salida de flujo. A continuación, se describen sin entrar en detalle el significado físico de cada una de estas condiciones de contorno.

- **Velocity inlet:** se emplea para definir la velocidad y otras propiedades escalares en las zonas de entrada de flujo.
- **Pressure inlet:** se emplea para definir la presión total y otras propiedades escalares en las zonas de entrada de flujo.
- **Mass flow inlet:** se emplea en flujos compresibles para fijar un gasto másico a la entrada. No es necesario emplear esta condición para flujos incompresibles, ya que la densidad permanece constante, y la condición de velocity inlet fija automáticamente el valor del gasto másico.
- **Pressure far-field:** se emplea para modelizar un chorro libre especificando el número Mach y otras propiedades escalares. Esta condición de contorno solo se puede aplicar para flujos compresibles.
- **Outflow:** se emplea para modelizar la salida del flujo cuando no se conocen a priori los valores de velocidad y presión a la salida. Esta condición es apropiada cuando el flujo se encuentra totalmente desarrollado a la salida, asumiendo que la componente normal del gradiente del resto de propiedades excepto la presión es nulo. No es apropiada para flujos compresibles.
- **Intake vent:** se emplea para definir coeficientes de pérdidas, dirección de flujo, temperatura y presión ambiente a la entrada del flujo.
- **Intake fan:** es similar a la condición inlet vent sólo que para casos de flujos externos.
- **Outlet vent:** se emplea para definir coeficientes de pérdidas, dirección del flujo, temperatura y presión ambiente a la salida del flujo.
- **Exhaust fan:** se emplea para establecer las condiciones fluidas, térmicas y de presión, en las que ha de producirse la salida del flujo.

Para aquellas condiciones asociadas a zonas donde no existe entrada ni salida de flujo, Fluent permite implementar cuatro tipos de condiciones de contorno: wall, simmetry, periodic y axis. A continuación, se describe brevemente el significado físico de cada una de estas condiciones de contorno.

- **Wall:** se emplea para introducir la condición de contorno asociada a una superficie sólida o pared. En ella se pueden especificar propiedades como la transmisión de calor, la rugosidad, etc.

La variable ***h2o<t>*** (trazador) ha sido definida anteriormente, al definir el modelo de transporte de especies, mientras que la zona "*trazador*" se definió en Gambit.

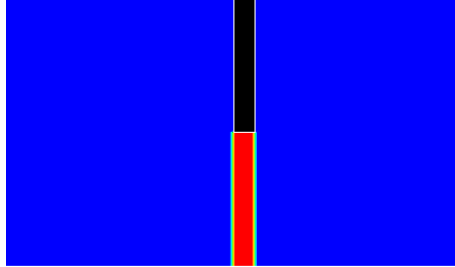


Figura 2.19- Inyección

Una vez que ya conocemos cómo inyectar el trazador debemos decidir si la inyección va a ser de tipo impulso o escalón.

2.3.1. Inyección impulso.

En la inyección de tipo impulso Fluent inyectará ***h2o<t>*** en la zona "*trazador*" durante un diferencial de tiempo, y de forma inmediata se desactivará la inyección (realmente Fluent inyectará la "especie" durante un *time step*).

Para ello seguiremos los siguientes pasos:

1. Una vez dentro del menú **Solve / Initialize** se debe buscar en la ventana **Zones to Patch** el nombre del volumen donde se quiere inyectar (ya anteriormente definido en Gambit) en nuestro caso "*trazador*".
2. Dentro de la ventana **Variable** seleccionaremos ***h2o<t>*** que en nuestro caso es el nombre que toma la especie trazador.
3. Por defecto **Value** se mantiene a "**0**" (en color gris claro). En el instante de la inyección, éste valor se ha de cambiar a "**1**", momento en el cual el volumen "*trazador*" pasará a contener ***h2o<t>***.
4. Tras una iteración (*time step*) automáticamente la inyección se desactivará consiguiendo una inyección de tipo impulso.

Para determinar qué cantidad de trazador hay en nuestro reactor en cada instante de tiempo podemos utilizar el menú **Solve/Monitors/Volume**

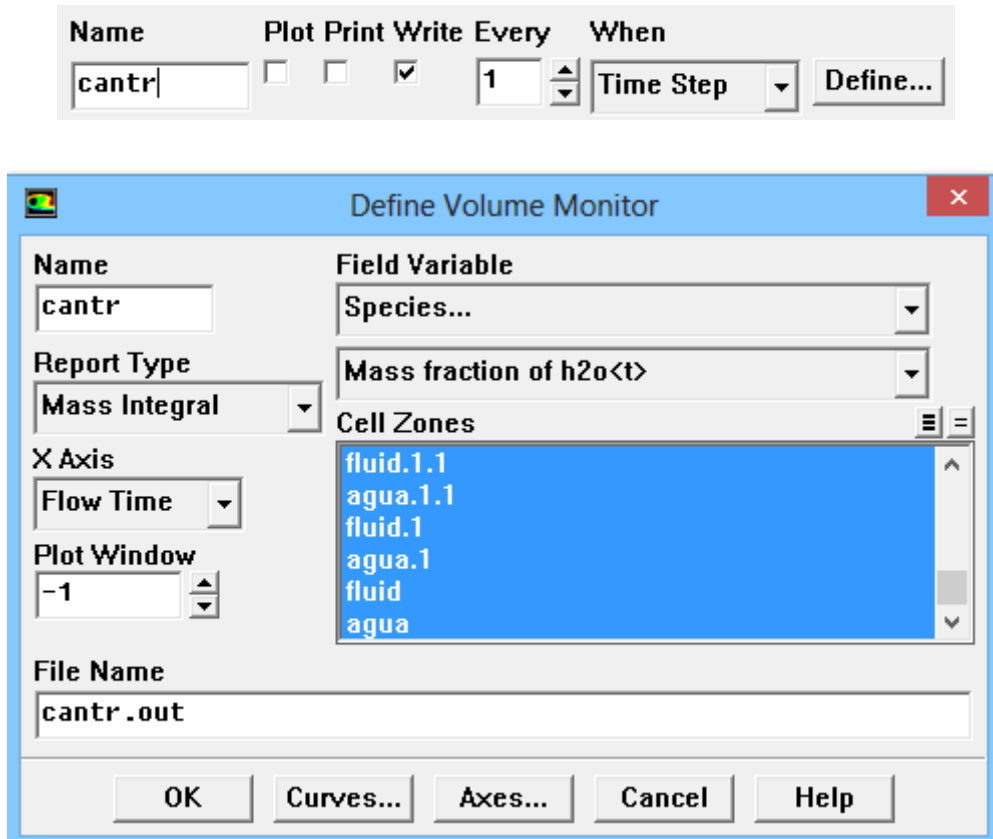


Figura 2.21- Define Volume Monitor

Deberemos seleccionar *Mass Integral* en *Report Type* y *Flow Time* en *X Axis*.

En la Figura 2.22 podemos visualizar la cantidad de trazador que hay dentro del reactor en función del tiempo. Esta gráfica nos puede ayudar a conocer cuál es la cantidad de trazador inyectado así como también el tiempo necesario para que todo el trazador cruce la zona de salida.

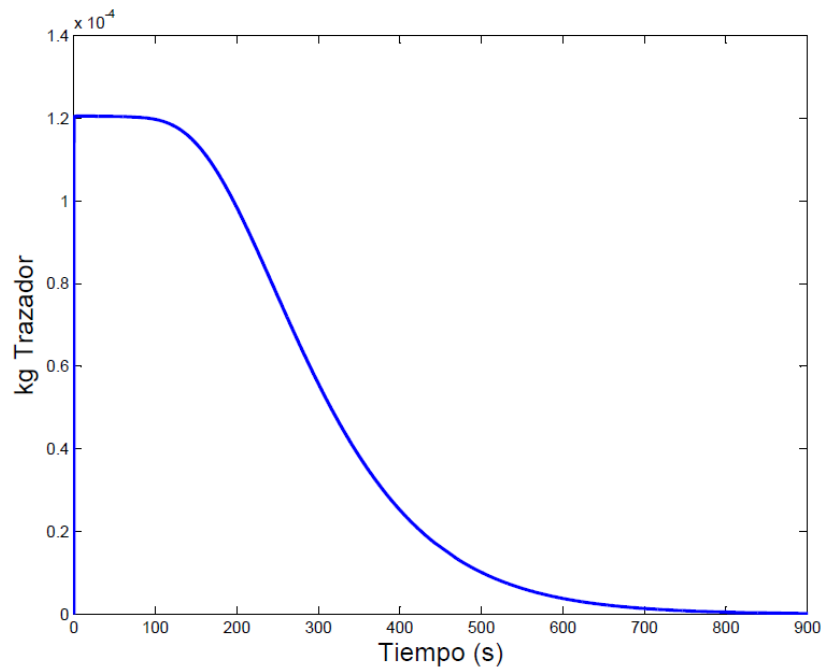
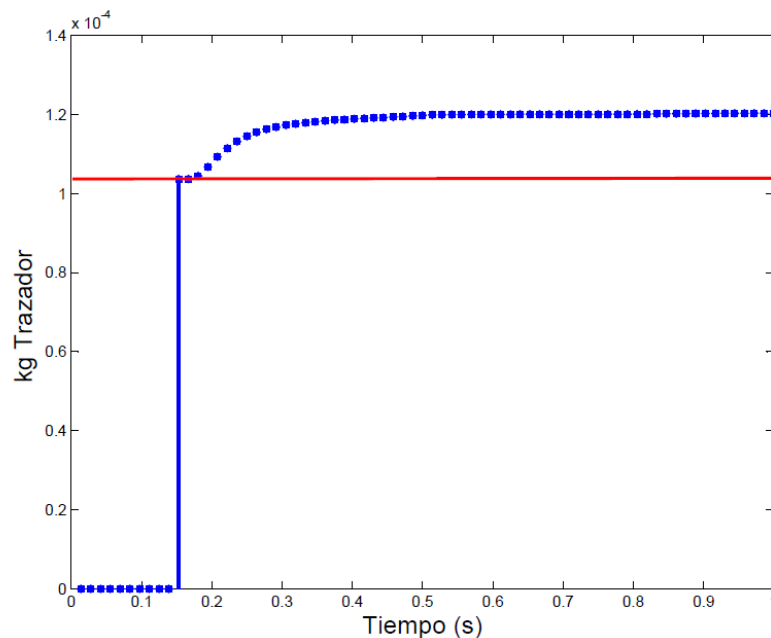


Figura 2.22-Cantidad de trazador en el interior del reactor en función del tiempo.

Como se puede observar la cantidad de trazador inicial no coincide con la cantidad de trazador inyectado teóricamente. Si hacemos un zoom en los primeros segundos (ver Figura 2.23) del proceso de inyección observamos lo siguiente:



2.23-Proceso de inyección

En un primer momento se inyecta la cantidad teórica (línea roja) pero hay un periodo de tiempo (0.2 s) en el que se produce una inestabilidad aumentando el trazador hasta

otra cantidad relativamente próxima. No conocemos bien el motivo, en cualquier caso este último método de evaluación de la cantidad de trazador inyectado es útil para conocer exactamente la cantidad de trazador que realmente se ha inyectado.

Nota: Para evitar confusiones recomiendo determinar la cantidad de trazador que se ha inyectado una vez pasado un tiempo simbólico (aproximadamente 2 o 3 segundos).

La inyección se puede generar mediante unas líneas en el Journal. En este PFC se ha utilizado un código Matlab para la generación del Journal, en la Figura-2.24 se puede ver las líneas de código utilizadas.

```
%INYECCIÓN IMPULSO DE UN TRAZADOR
fwrite(fid, '/solve/patch');
fprintf(fid, '\n');
fwrite(fid, 'trazador');
fprintf(fid, '\n');
fprintf(fid, '\n');
fwrite(fid, 'species-0');
fprintf(fid, '\n');
fwrite(fid, '1');
fprintf(fid, '\n');
```

Figura 2.24-Líneas de código en Matlab que genera la inyección impulso de un trazador

En la Figura 2.25 se visualiza el proceso de inyección que se ha llevado a cabo. Durante un instante de tiempo muy pequeño (time-step) el volumen situado entre un diafragma ha sido ocupado por un trazador, pasado ese tiempo se ha desactivado la inyección consiguiendo de este modo una *Inyección de tipo impulso*.

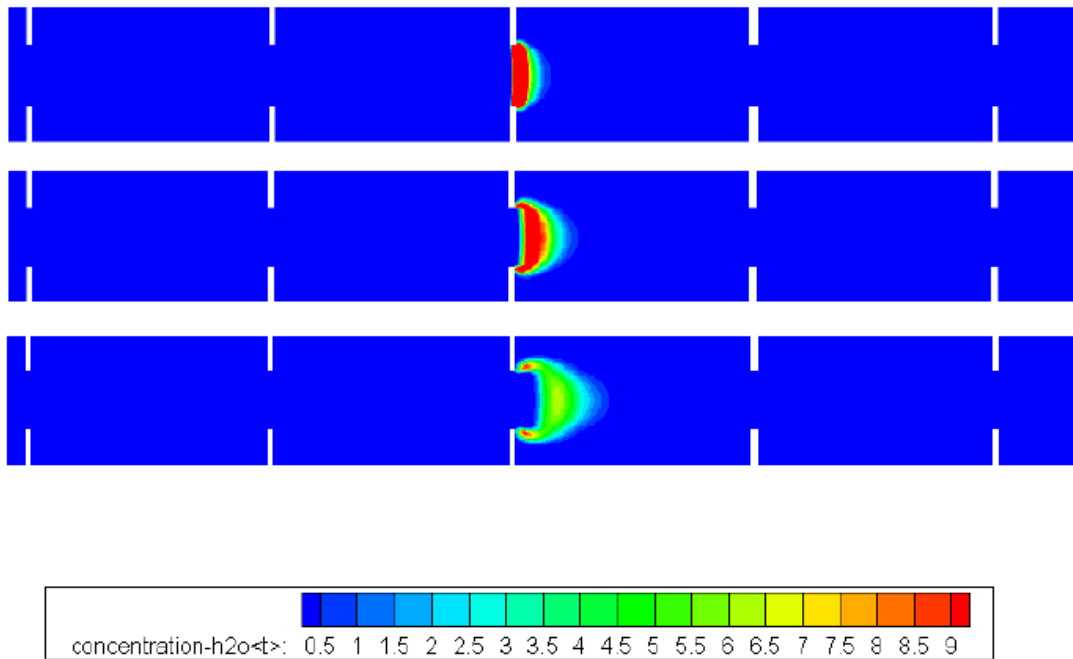


Figura 2.25-Proceso de inyección tipo *Impulso*

2.3.3. Inyección escalón

Aunque en este PFC no se ha utilizado la inyección escalón, pasaré a explicarlo para futuros trabajos.

Para llevar a cabo una inyección de tipo escalón debemos seguir los mismos pasos que en la inyección de tipo impulso :

1. Una vez dentro del menú **Solve/Initialize** se debe buscar en la ventana **Zones to Patch** el nombre del volumen donde se quiere inyectar (y anteriormente definido en Gambit) en nuestro caso "*trazador*".
2. Dentro de la ventana Variable seleccionaremos *h2o<t>* que en nuestro caso es el nombre que toma la especie trazador.
3. Como se puede ver, por defecto **Value** se mantiene a "**0**" (en color gris claro). En el instante de la inyección, éste valor se ha de cambiar a "**1**" momento en el cual el volumen "*trazador*" pasará a contener *h2o<t>*.
4. Tras una iteración (*time step*) automáticamente la inyección se desactivará consiguiendo una inyección de tipo impulso.

5. Si queremos conseguir una inyección de tipo escalón deberemos realizar el **paso 3** tras cada iteración *time step*. De esta manera en cada *time step* estaremos introduciendo trazador y consiguiendo lo que se conoce como una inyección de tipo escalón.

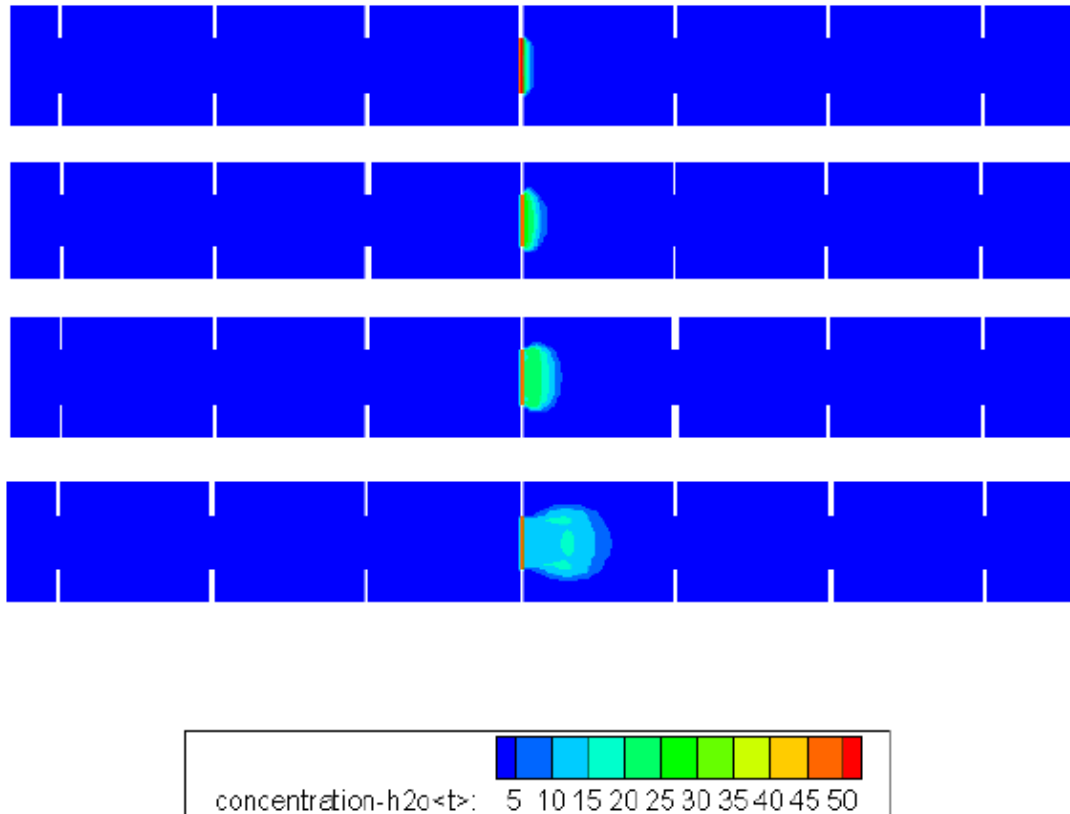


Figura 2.26-Proceso de inyección tipo *Escalón*

2.4. Distancia de seguridad para inyectar el trazador

En esta sección se ha desarrollado un método para calcular la distancia mínima de seguridad para inyectar el trazador.

Uno de los problemas que encontramos al resolver la inyección de especies en un OBR es la pérdida de especie en la entrada. La razón es simple, la cantidad de trazador que atraviesa una condición de contorno (en nuestro caso entrada o salida) se pierde y no

se vuelve a contabilizar. Es decir, si a causa del movimiento oscilatorio, una porción de trazador atraviesa la sección de entrada o de salida, aunque debiera volver a entrar ya no lo hará.

Para obtener la mejor posición, de entre todos los pasos en los que se puede inyectar el trazador, partimos de la premisa de que tenemos que dejar una distancia de seguridad para que el trazador no escape por la entrada.

Además, se busca que esa distancia de seguridad sea la mínima posible, ya que en caso contrario se estaría simulando parte de reactor que no aportaría nada a nuestro estudio con su consiguiente gasto computacional. La única parte que interesa desde el punto de vista descriptivo es la distancia desde el punto de inyección hasta la sección de medida de concentración.

2.4.1. Método de las secciones

El método de las secciones consiste en realizar un reactor lo suficientemente largo como para inyectar en el centro de éste y evaluar la cantidad de trazador que pasa a través de varias secciones aguas arriba de la inyección.

A una cierta distancia aguas arriba de la inyección, la cantidad de trazador que pasa por una superficie será despreciable, ésta será la distancia de seguridad que deberemos utilizar.

Es importante mencionar que la pérdida de especie depende de las condiciones de operación, por lo que deberemos realizar el ensayo para la situación más desfavorable o bien para cada una de ellas.

A continuación describiré los pasos a seguir.

1. Se construirá el reactor inyectando en el centro de éste (ver Figura 2.27).
2. La variable que se monitoriza en cada sección es la fracción másica de trazador. En las secciones el tipo de reporte será "*Flow Rate*" (*Flow time*). Con ayuda de este reporte seremos capaces de conocer la cantidad de trazador que atraviesa cada sección.
3. Para conocer la cantidad de trazador que hay dentro del reactor en cada instante de tiempo haremos uso de "*Define Volume Monitor*" **Solve > Monitor > Volume**. La variable a evaluar será la fracción másica de trazador y el tipo de reporte será "*Mass Integral*" (*Flow time*).

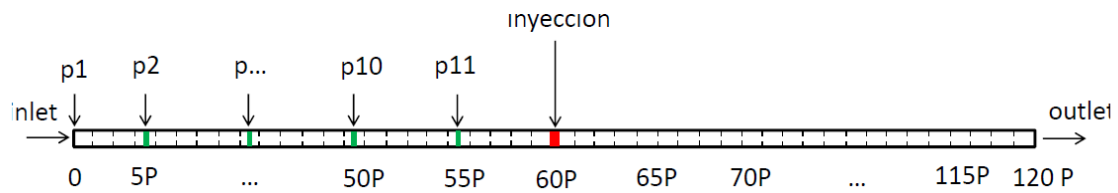


Figura 2.27-Modelo del reactor para el Ensayo de pérdidas de especies.

Si representamos el flujo másico de trazador a través de la sección 5 (p5) obtenemos la Figura 2.28, en la que se representa el Flujo másico de trazador que pasa a través de dicha sección.

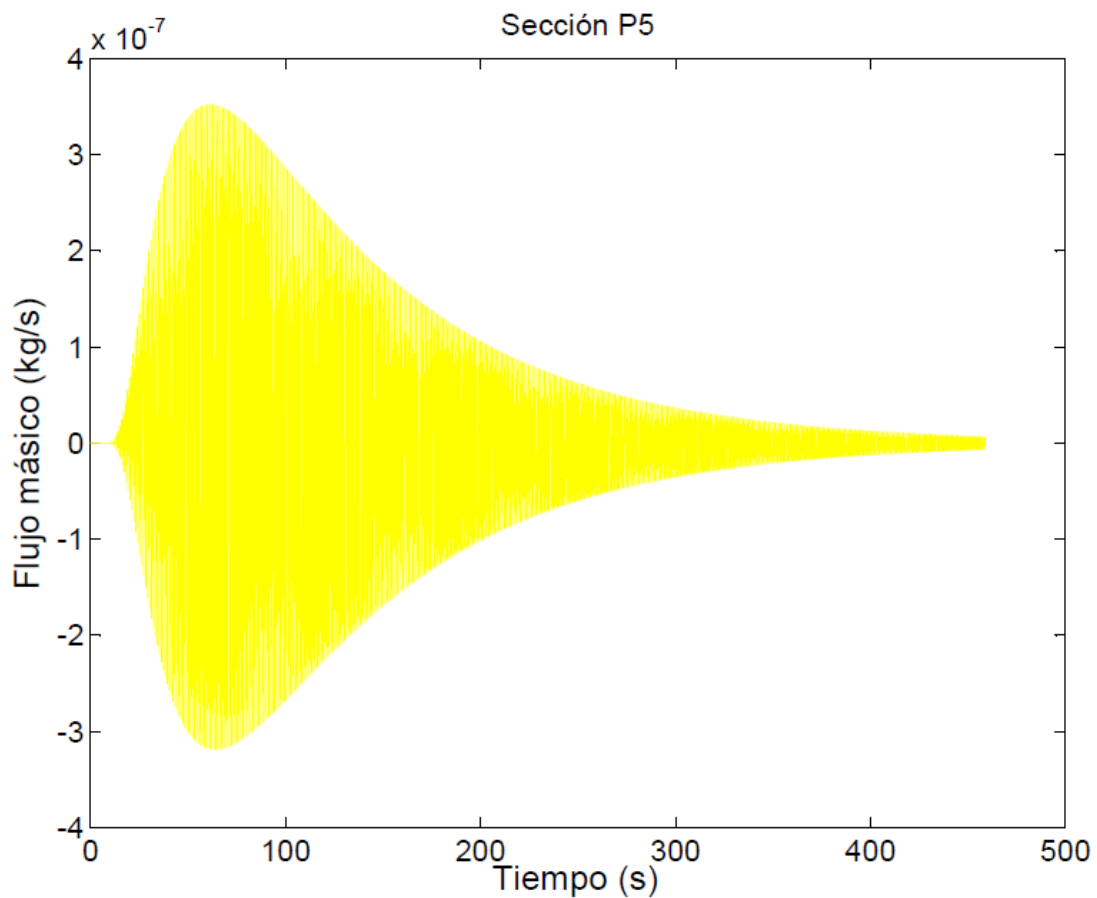


Figura 2.28-Flujo másico que atraviesa la sección 5

El motivo de tener flujos másicos negativos a través de la sección es debido al signo del producto escalar del vector velocidad y el vector superficie de la sección. En nuestro caso, el vector superficie tiene sentido positivo sobre el eje X.

Si integramos la curva obtenida anteriormente, obtendremos la cantidad de trazador que atraviesa esta superficie. Para conocer qué cantidad de trazador atraviesa esta sección hacia la izquierda, deberemos quedarnos con la parte negativa de esta curva como se muestra en la Figura 2.29.

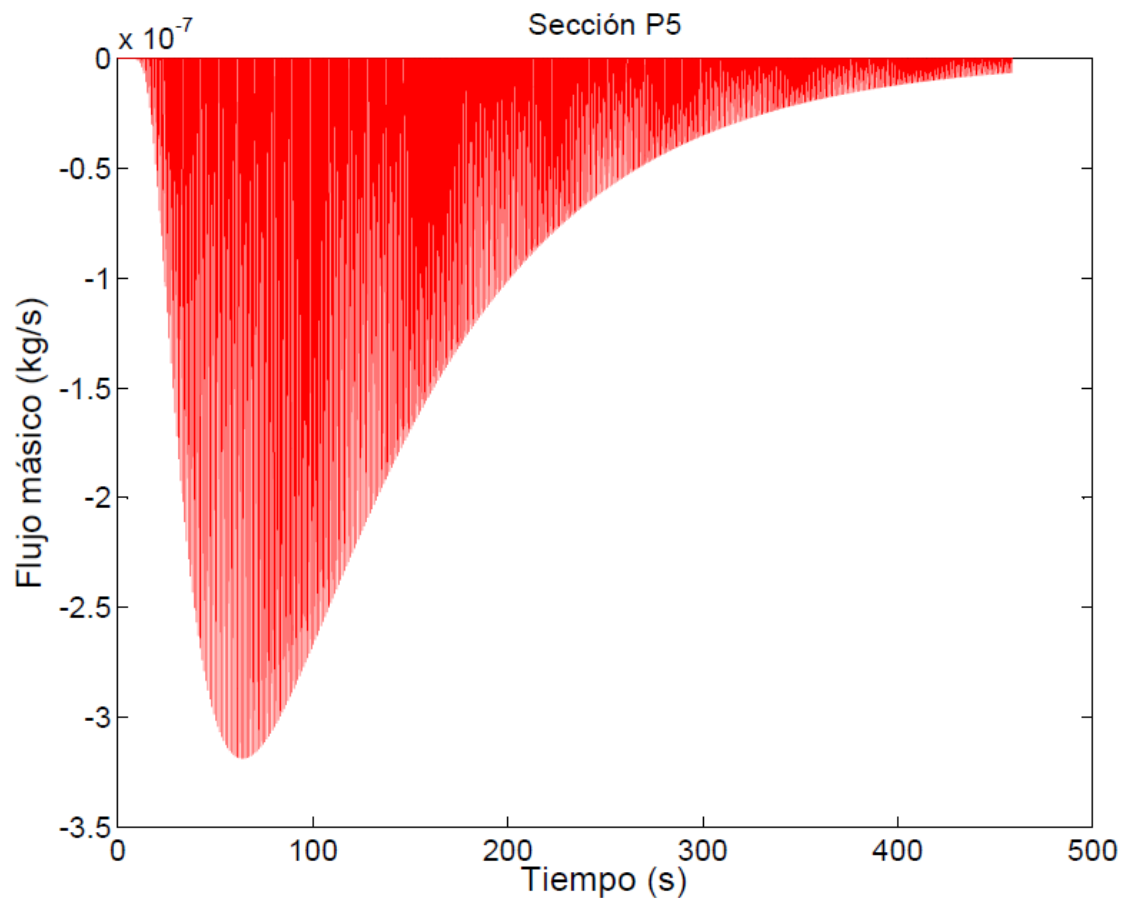


Figura 2.29- Flujo másico de trazador que cruza la sección 5 de derecha a izquierda

Si integramos el área bajo la curva, podemos determinar la masa de trazador que atraviesa la sección 5 de derecha a izquierda.

En la Figura 2.30 se muestra la cantidad de trazador acumulado que atraviesa dicha superficie a lo largo del tiempo. Podríamos pensar que si esta sección en realidad fuera la sección de entrada la cantidad de trazador que escaparía sería la misma. En realidad esto no es del todo cierto, ya que si esta sección se comportase como la sección de entrada, toda la masa que atraviesa dicha sección no volvería a pasar por ella y como se puede observar en la Figura 2.28 la masa de trazador atraviesa varias veces la misma sección.

Realmente si la sección 5 fuera la sección de salida de nuestro reactor, la cantidad de trazador que escaparía sería algo inferior.

Este ensayo nos puede dar una idea de la distancia entre la entrada y la inyección, pero realmente no nos da información sobre la cantidad de trazador que va a escapar.

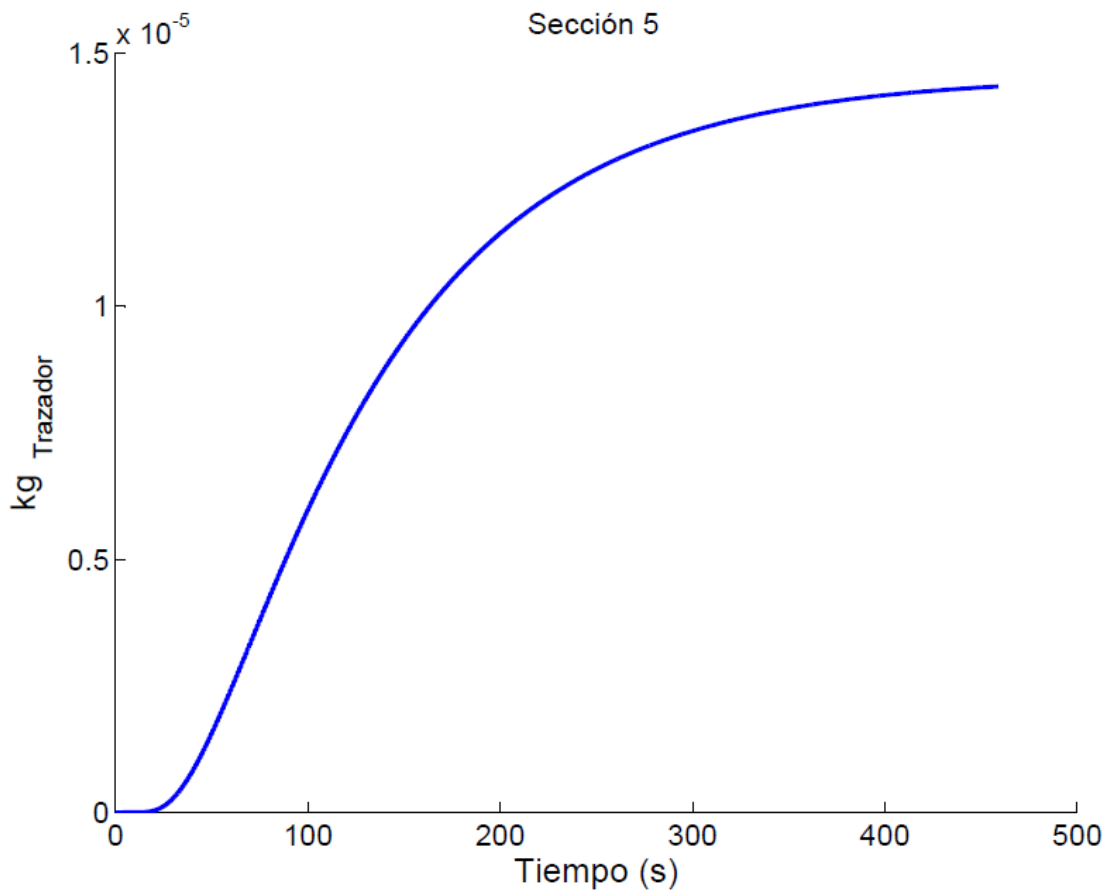


Figura 2.30-Cantidad de trazador que cruza la sección 5 de derecha a izquierda

Una vez explicado el método vamos a representar en una única gráfica la cantidad de trazador que atraviesan las secciones de derecha a izquierda (ver Figura 2.31)

Para la creación de nuestro OBR se han seleccionado 30 pasos hasta el punto de inyección por considerar que es la distancia óptima. Es recomendable que las pérdidas a través de la entrada sean inferiores al 1%.

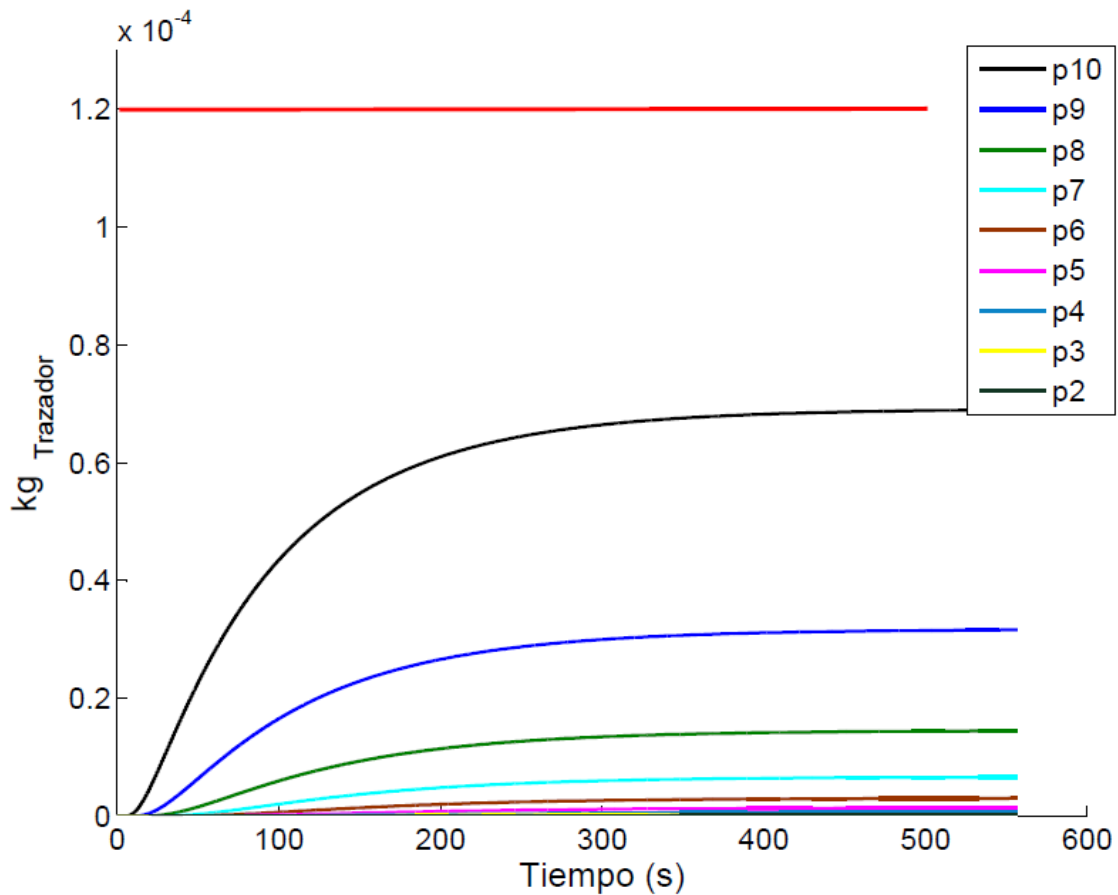


Figura 2.31- Cantidad de trazador que atraviesan las diferentes secciones

Aunque el método anterior sea una buena forma de conocer cuántos pasos debemos dejar entre la entrada y la inyección para que la especie que escape por la entrada sea despreciable, los resultados que se obtienen no son los reales. Por lo que recomiendo que una vez esté diseñado el reactor y se simule un caso completo, se evalúe cual es la cantidad real que escapa por la entrada y la salida así como también la cantidad de trazador inyectado.

2.5. Evaluación de la cantidad de trazador que escapa por la entrada y la salida.

Para evaluar la cantidad de trazador que escapa en nuestro reactor a través de la entrada y la salida se ha monitorizado en la sección de entrada y salida la fracción másica de trazador mediante el reporte "*Flow Rate*" (*Flow time*) y un posterior Postproceso mediante Matlab.

```
clear all
close all
format long e

hold on
zoom on

[impc]=importdata('pent.out'); % Carga los datos Flow Rate de la
sección de entrada.
a=impc.data;

tpaso=abs(a(2,1)-a(3,1))%solo válido cuando el paso de tiempo es
constante

%Integra para determinar la cantidad de trazador acumulado que escapa
por
%la entrada
for i=1:(length(a)-1)
    inta(i)=(a(i,2)+a(i+1,2))/2*tpaso;
    ya=cumsum(inta);
    ta(i)=i*tpaso;
end

pent=trapz(a(:,1),a(:,2)) %Obtenemos el mismo resultado integrando por
el método de los trapecios

plot(ta,-ya,'m-') % Representa la curva de trazador acumulado que
escapa por la entrada

[impc]=importdata('pout.out'); % Carga los datos Flow Rate de la
sección de salida.
b=impc.data;

%Integra para determinar la cantidad de trazador acumulado que escapa
por
%la salida
for i=1:(length(b)-1)
    intb(i)=(b(i,2)+b(i+1,2))/2*tpaso;
    yb=cumsum(intb);
```



```
    tb(i)=i*tpaso;
end

psal=trapz(b(:,1),b(:,2)) %Obtenemos el mismo resultado integrando por
el método de los trapecios

plot(ta,-yb,'m-') % Representa la curva de trazador acumulado que
escapa por la salida

%Suma la cantidad de trazador que escapa por la entrada y la salida
for j=1:length(ya)
    total(j)=ya(j)+yb(j);
end

plot(ta,-total,'b-') %Representa la cantidad de trazador que escapa
por la entrada y la salida

ini=() %Cantidad de trazador que se inyecta (Se obtiene del programa)

plot(ta,ini,'black') %Representa la cantidad de trazador que se
inyecta

legend('Acumulado Ent','Acumulado Sal','Acumulado Total','Inicial')
%leyenda

display(' % perdida entrada')
(-pent/ini)*100
display(' % perdida salida')
(-psal/ini)*100

display('% perdidas')

((-psal-pent)/ini)*100
```

Mediante este código se han obtenido las curvas que representan la cantidad de trazador que escapa por la entrada, la salida y el total (ver Figura 2.32 y Tabla 2.1). Conocido el trazador que se ha inyectado (ver capítulo), podemos conocer qué porcentaje de trazador ha escapado.

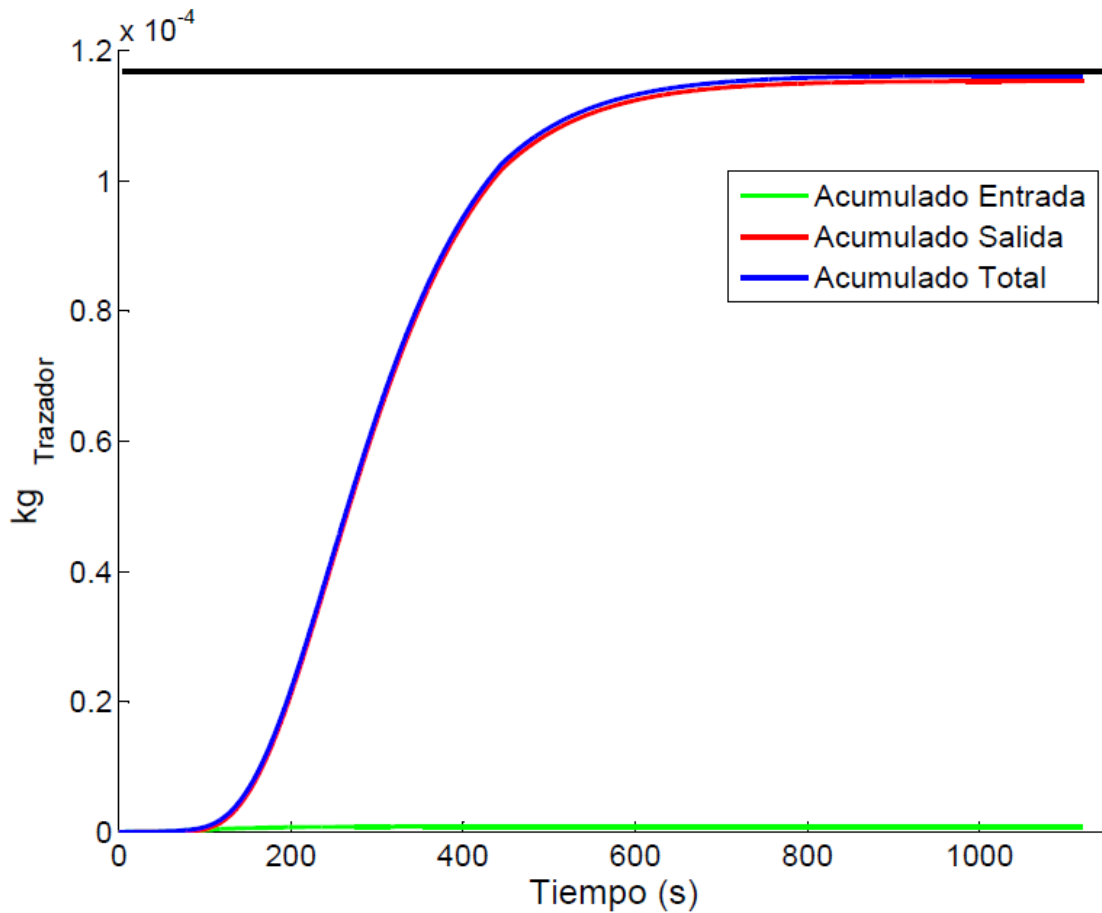


Figura 2.32- Representación de la cantidad de trazador que escapa en una simulación completa

Caso NRM $f=1\text{Hz}$	
Cantidad inyectada (kg)	$1.2393\text{e-}4$
Cantidad que escapa por la entrada (kg)	$8.46064\text{e-}7$ (0.6 %)
Cantidad que escapa por la salida (kg)	$1.2309\text{e-}4$ (99.4%)

Tabla 2.1-Pérdidas a través de la entrada y la salida.

Hemos considerado que unas pérdidas inferiores al 1% a través de la entrada son despreciables. Es importante tener en cuenta que las pérdidas dependerán de las condiciones de operación del reactor, ya que las velocidades pico que se alcanzan serán diferentes. En este proyecto para dar por válidos los resultados se han considerado unas pérdidas máximas del 1%.

BLOQUE II

Flujo oscilatorio

Capítulo 3: Estudio de OBR con flujo oscilatorio y deflectores fijos.

3.1. Definición del dominio computacional.

El problema fluido dinámico que se plantea en este Bloque II, es el estudio del proceso de mezclado en un reactor de flujo oscilatorio (Oscillatory Baffled Reactor, OBR) con deflectores fijos. El estudio se centra en el problema mecánico del flujo oscilatorio, sin abordar el problema térmico.

El proceso de mezclado se estudiará mediante la inyección de un pequeño volumen de **trazador** en el interior del reactor. La distribución de trazador será analizada como una función del tiempo en una localización axial determinada, como es utilizado a menudo en análisis experimentales (experimento en pulso).

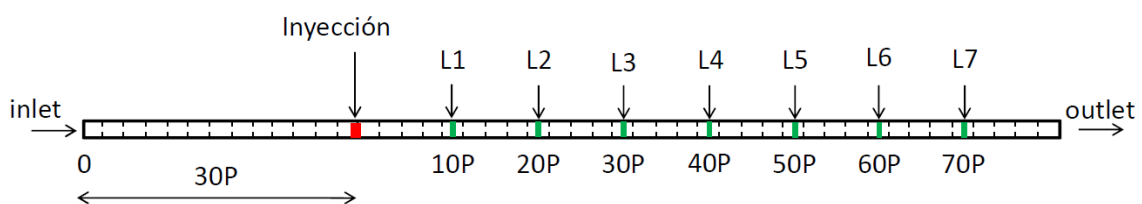


Figura 3.1- Punto de inyección y de medición de la concentración.

El reactor estará formado por 110 pasos e inyectaremos en el paso 30. Dispondremos de varias superficies en las que se evaluará la concentración, éstas estarán dispuestas cada 10 pasos aguas abajo de la inyección (ver Figura 3.1).

3.2. Geometría estudiada.

La geometría del problema a resolver está compuesta por un conducto liso de sección transversal circular de diámetro $D = 25\text{ mm}$, en el que se insertan equiespaciados a una distancia $L = 37.5\text{ mm}$, una serie de discos con orificio de diámetro interior $D_0 = 11.5\text{ mm}$ y espesor $e = 1\text{ mm}$ (ver Figura 3.2).

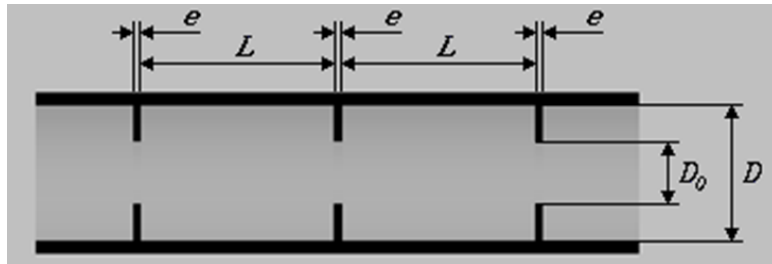


Figura 3.2- Geometría del reactor de flujo oscilatorio.

La periodicidad geométrica que existe en dirección longitudinal permite definir un **paso espacial** como la región de conducto, de longitud $L + e$, centrada en torno a uno de los discos insertados (Figura 3.3).

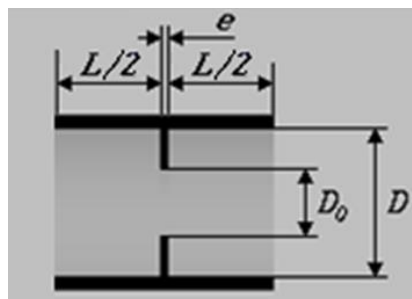


Figura 3.3- Paso espacial del reactor de flujo oscilatorio.

En el modelo 2D, gracias a la simetría axial de la geometría, el dominio computacional se reduce a la mitad de la sección longitudinal de un paso espacial (Figura 3.4).

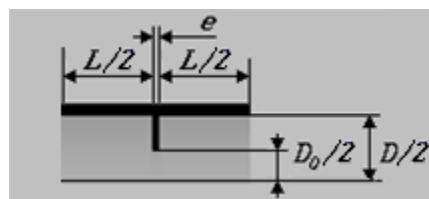


Figura 3.4- Paso espacial del modelo 2D

3.3. Metodología de simulación

En la metodología de simulación que se lleva a cabo para abordar la resolución del campo de velocidades y el transporte de especies en un *OBR* es preciso distinguir entre **simulación estacionaria** y **simulación no estacionaria** (ver Figura 3.5). El problema del flujo oscilatorio es inherentemente no estacionario puesto que las leyes de gobierno del movimiento del fluido son leyes sinusoidales temporales.

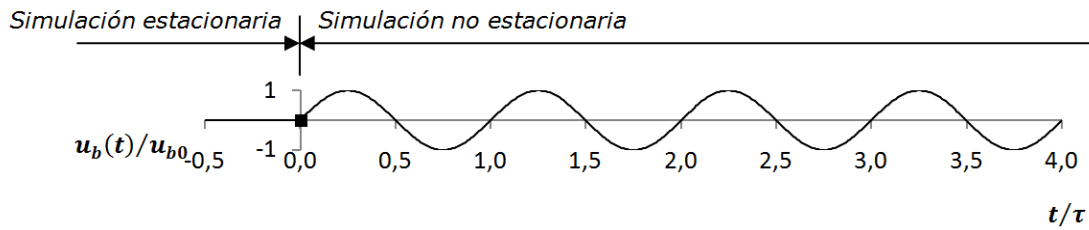


Figura 3.5- Simulación estacionaria y simulación no estacionaria.

A partir del caso de inicio del ciclo comienza la simulación no estacionaria, con gasto másico variable en el tiempo. Para ello es preciso discretizar, imponiendo un paso de tiempo en el eje temporal, que se obtiene mediante la **condición de Courant-Friedrich-Levy** (condición CFL), y que para el caso de n dimensiones toma la forma:

$$\Delta t \sum_{i=1}^n \frac{u_{xi}}{\Delta x_i} \leq C$$

siendo Δt el paso de tiempo, Δx_i el tamaño de la celda en la dirección i , u_{xi} la velocidad en la celda de tamaño Δx_i y C el número de Courant.

Matemáticamente, la condición CFL es una condición de **convergencia** para ecuaciones diferenciales en derivadas parciales. Para esquemas explícitos es $C = 1$, mientras que para esquemas implícitos es $C = \infty$. Nótese que la aplicación en Fluent del *solver Pressure Based*, por tratarse de flujo incompresible, conlleva obligatoriamente el uso de un esquema implícito, por lo que a priori el requisito de CFL no sería de aplicación en el presente Proyecto. Sin embargo, desde el punto de vista de la **estabilidad** de la solución, sí existen recomendaciones acerca de la limitación del número de Courant.

3.3.1. Periodicidad temporal

En la simulación no estacionaria, que comienza a partir del caso inicial de la simulación estacionaria, se produce un transitorio que ha de superarse hasta alcanzar una solución periódica en el tiempo. Es decir, existe un número determinado de ciclos temporales al comienzo de la simulación no estacionaria en los que la solución difiere de un ciclo a otro. Este periodo se denomina **simulación transitoria** y su duración está condicionada por la fase del ciclo que se elija para iniciar la ley sinusoidal temporal [14], [15].

Una vez superado el transitorio se alcanza la periodicidad temporal, comenzando el periodo denominado **simulación periódica temporal** (Figura 3.6). Para identificar cuántos ciclos tarda en aparecer este periodo se compara la solución en sucesivos ciclos de oscilación hasta encontrar una diferencia despreciable entre un ciclo y el siguiente.

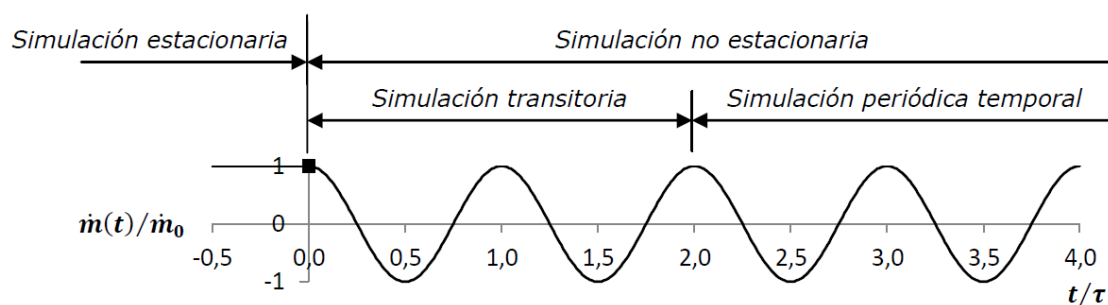


Figura 3.6 - Simulación transitoria y simulación periódica temporal

3.3.2. Periodicidad espacial

La geometría del reactor de flujo oscilatorio se compone de un determinado número de pasos espaciales consecutivos, centrados en los discos insertados. Esta **periodicidad geométrica** se traduce en una periodicidad espacial de la solución numérica dentro del dominio computacional, ya que el patrón de movimiento del flujo ha de ser el mismo en cada uno de los pasos espaciales, salvando las inestabilidades propias de la turbulencia.

3.4. Resolución del problema

A continuación se explica el procedimiento que se ha realizado para la resolución del problema en Fluent.

Nuestro OBR tendrá un flujo oscilatorio a la entrada que dependerá de las condiciones de operación. Este flujo se puede imponer en Fluent como un perfil plano de velocidad a la entrada del tubo, pero tendremos una cierta longitud de adaptación hasta conseguir el perfil de velocidad que tendríamos en un caso real.

Para solventar este problema, se resuelve un caso estacionario en un tubo formado por dos pasos. Se impondrá un gasto másico a la entrada y la salida tal que la velocidad media sea la que necesita el experimento en cuestión. En la sección central de este tubo formado por dos pasos se "tomará" el perfil desarrollado y se "pegará" en el reactor formado por 110 pasos, con el objetivo de poder iniciar el flujo como si ya hubiese una corriente desarrollada en su interior.

Podemos resumir el problema en los siguientes pasos:

1. Crear un modelo formado por dos pasos y configurar en el mismo las propiedades.
2. Definir condiciones periódicas en la entrada y la salida.
3. Resolver en estacionario y obtener una solución del campo de velocidades en la sección central del tubo de dos pasos.
4. Copiar el perfil de velocidades de la sección y pegarlo en el reactor de 110 pasos.
5. Resolver tantos pasos de tiempo necesarios como sea necesario para que el trazador llegue a la salida.

3.4.1. Definición de las condiciones periódicas en la entrada y la salida

Al definir las condiciones periódicas para la entrada y la salida lo que se está imponiendo es que tanto a la entrada como a la salida se tenga el mismo perfil de velocidades. Como al introducir los deflectores fijos se desconoce cuál va a ser el campo de velocidades del fluido en el interior del tubo, se ha de introducir el gasto másico tal que la velocidad media sea la que se necesita en el experimento en cuestión, para ello se ha de conocer la sección efectiva y la velocidad, ya que el gasto se define como:

$$G = \rho v A_{sección}$$

Para definir las condiciones periódicas en la entrada y la salida se deberá usar el siguiente comando:

1. **/Define/boundary-conditions/modify-zone/make-periodic**

```
//define/boundary-conditions/modify-zones>
activate-cell-zone      list-zones          sep-cell-zone-region
append-mesh            make-periodic        sep-face-zone-angle
append-mesh-data       matching-tolerance   sep-face-zone-face
create-all-shell-threads merge-zones       sep-face-zone-mark
deactivate-cell-zone    mrf-to-sliding-mesh  sep-face-zone-region
delete-all-shells      orient-face-zone     slit-face-zone
delete-cell-zone        repair-face-handedness slit-periodic
extrude-face-zone-delta repair-periodic      zone-name
extrude-face-zone-para  replace-zone        zone-type
fuse-face-zones         sep-cell-zone-mark

//define/boundary-conditions/modify-zones> make-periodic
Periodic zone [{}]
```

Figura 3.7- Definición de las condiciones periódicas.

2. Tras esto el programa pide las zonas donde se quiere establecer la condición de periodicidad, en este caso interesan la entrada (**inlet.1**) y la salida (**outlet**) por tanto introduciendo en primer lugar **inlet.1** pulsando *intro* y en segundo lugar **outlet** tras lo cual se ha de pulsar *intro* dos veces.
3. El programa pregunta si se desean condiciones periódicas rotacionales, se debe teclear **no** pues nos interesan condiciones periódicas traslacionales, por tanto tras introducir **no** y pulsar *intro* automáticamente el programa las escoge traslacionales.
4. A continuación pregunta si se desea crear condiciones periódicas respondiendo **yes**, tras esto y por último pregunta *autodetect translation* vector se introduce de nuevo **yes**.
5. De esta forma se activará la opción **periodic-condition** en la pestaña **define**.

Abriendo esta pestaña aparecerá la siguiente ventana (Figura 3.8), Donde se debe especificar qué tipo de movimiento gobierna, en este caso como se comentó se introducirá el gasto másico.

Así pues en la ventana **Type** selecciona **Specify Mass Flow**, en el cuadro **Mass Flow Rate** se introduce el gasto calculado anteriormente, como se aprecia está en kg/s, mientras que la dirección de flujo es en según el eje x, por tanto, en **Flow Direction** se ha de imponer 1 en el recuadro del eje x.

Dejando el resto de opciones por defecto, clic en **Ok**, ya se tendrán definidas las condiciones periódicas deseadas.

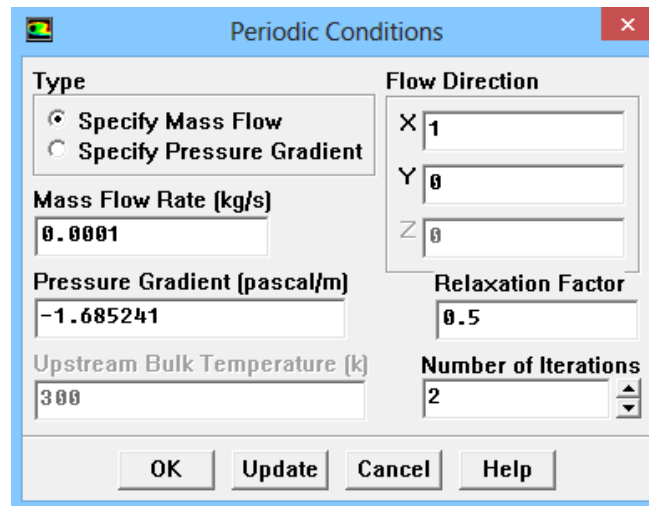


Figura 3.8- Periodic Conditions

3.4.2. Obtención del perfil de velocidad en el plano central

A la hora de realizar la simulación, con el fin de evitar el transitorio inicial, se simulará el flujo oscilatorio guardando los perfiles en la sección media del reactor de dos pasos (ver Figura 3.10) a partir del cuarto ciclo de oscilación, como se observa en la Figura 3.9.

Una vez obtenido este perfil, se procederá a "pegarlo" en el tubo de 110 pasos objeto de estudio, con lo cual se habrá conseguido obtener un perfil en poco tiempo válido para poder iniciar el flujo en el tubo largo como si ya hubiese una corriente desarrollada en su interior, que es el objetivo que sigue todo este entramado.

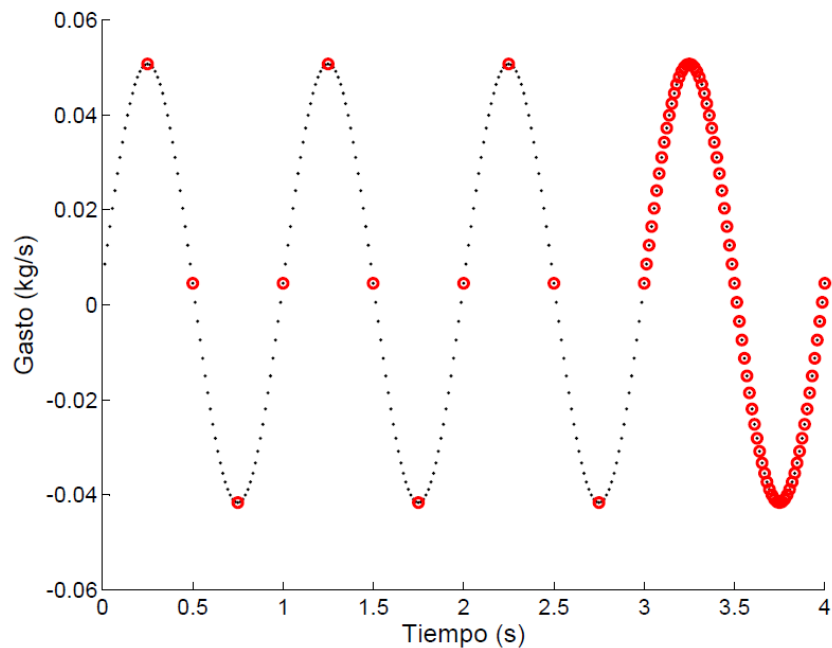


Figura 3.9- Pasos de tiempo en los que se guarda el perfil de velocidad en la sección "interior-14"

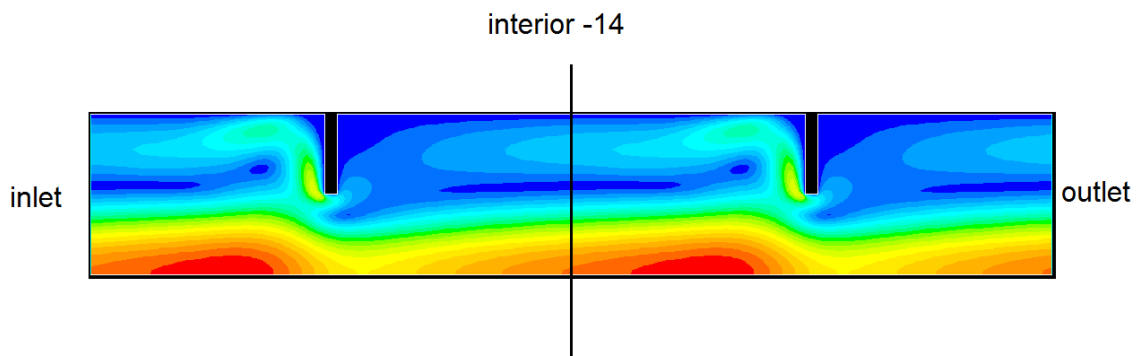


Figura 3.10- Simulación del caso estacionario en el que guardan los perfiles de la sección "interior-14"

Para ello se deberá proceder del siguiente modo:

1. **File/write/profile** desplegará la siguiente ventana.
2. Seleccionar ahora en **Options** *Define new Profiles*.
3. En **surfaces** se ha de seleccionar la cara central que se llama *interior-14* en este caso.
4. Mientras que en **values** que son todas las propiedades que Fluent va calculando se deben escoger *Axial Velocity* y *Radial Velocity*.
5. Clic en Write... e introduciremos el nombre del

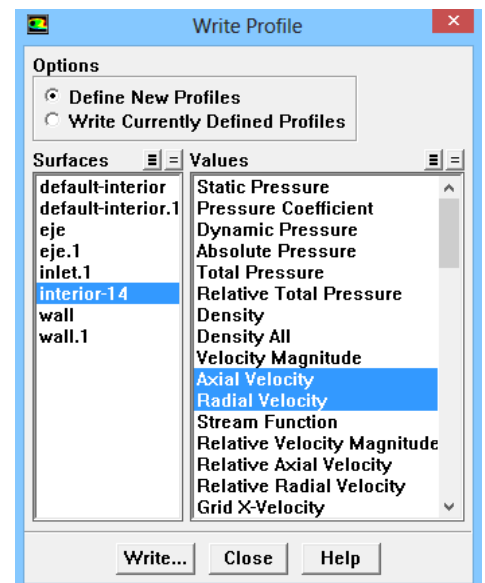


Figura 3.11- Write Profile

caso.

3.4.3. Carga del perfil en el OBR de 110 pasos

A continuación se desea introducir este perfil de velocidades en el tubo largo de 110 pasos, y a partir de aquí lanzar el caso y obtener la fracción másica de trazador en la salida del tubo, además de otros muchos planos intermedios que se han definido para ir viendo cómo evoluciona esta curva de trazador a lo largo del tubo. Para cargar el perfil se ha de proceder como sigue:

1. Abrir el caso de 110 pasos
2. **File/read/profile...** donde se debe ir al directorio donde se ha guardado el archivo y abrirlo.
3. En este fichero está la información sobre la velocidad y la posición de cada punto de la malla que define la sección, por tanto en **boundary-conditions** se debe especificar la velocidad de forma que se comience a resolver a partir del perfil cargado.
4. Set
5. En **Velocity Specification Method** se debe elegir *Components*, lo

que habilitará las componentes **Axial-Velocity** y **Radial-Velocity**.

Para cada componente se despliega una lista en la que se deberá seleccionar su velocidad correspondiente.

6. Clic en **OK**

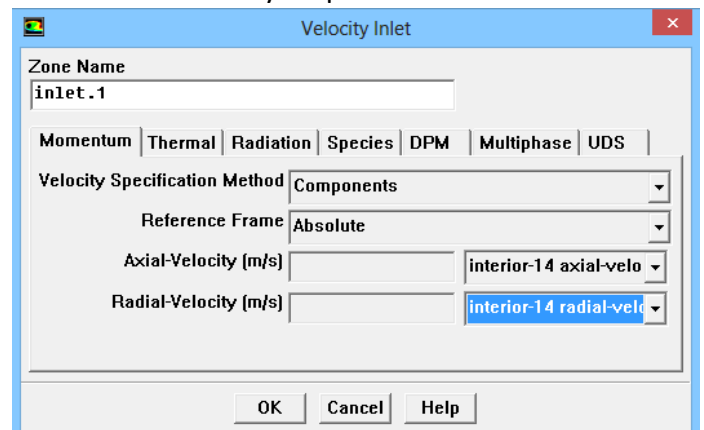


Figura 3.12- Velocity Inlet

Por tanto el programa ya tiene definido como debe iniciar la resolución del problema a partir del perfil cargado.

3.4.4. Archivos journal

Para realizar las sucesivas simulaciones se ha optado por la creación de varios archivos "journal" (.jou).

Un archivo *journal* es una serie de comandos almacenados en un archivo de texto. El archivo puede ser escrito en un editor de texto o generado por Fluent como una transcripción de los comandos dados a Fluent durante la sesión. Un archivo *journal* generado por Fluent incluirá todas las operaciones realizadas en la sesión.

Para grabar un archivo *journal* utilizando Fluent:

File > Write > Start Journal

Se realizan todas las tareas necesarias y después se para la grabación con:

File > Write > Stop Journal

En el presente proyecto se ha utilizado Matlab para generar los diferentes archivos de texto *journal*. Estos archivos debido a su tamaño no se han añadido al documento pero si se han guardado para futuros trabajos.

3.5. Composición de velocidades de entrada, flujo neto más flujo oscilatorio. Casos de estudio

En este Bloque II vamos a estudiar dos tipos de configuraciones:

- Condición de oscilación normal (Normal oscillatory conditions -NRM-)
- Condición de oscilación anormal (Abnormal oscillatory conditions -ABN-)

3.5.1. Normal oscillatory conditions (NRM)

La velocidad a la entrada del OBR estará formada por una componente neta u_{net} que desplazará la especie del punto de inyección hasta la salida y una componente oscilatoria u_{osc} generada por la oscilación del pistón.

$$u(t) = u_{net} + u_{osc} = u_{net} + 2\pi f x_0 \sin(2\pi f t)$$

En la Figura 3.13 se muestra la componente neta y la oscilatoria que proviene del movimiento del pistón. Estas componentes se pueden superponer formando el modelo de la Figura 3.14

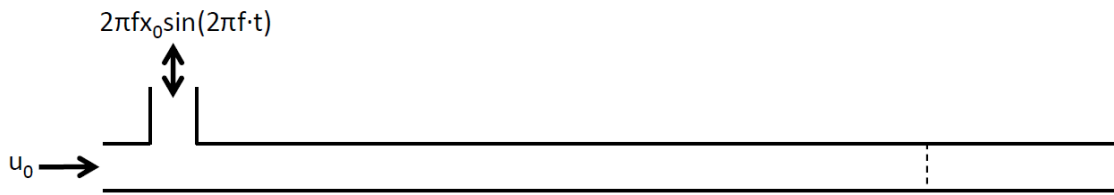


Figura 3.13- Flujo neto y flujo oscilatorio

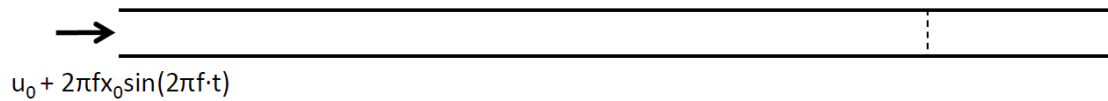


Figura 3.14- Composición de velocidades. Normal oscillatory conditions (NRM)

En la Figura 3.15 se muestra como varía la velocidad del flujo a la entrada del OBR en función del tiempo.

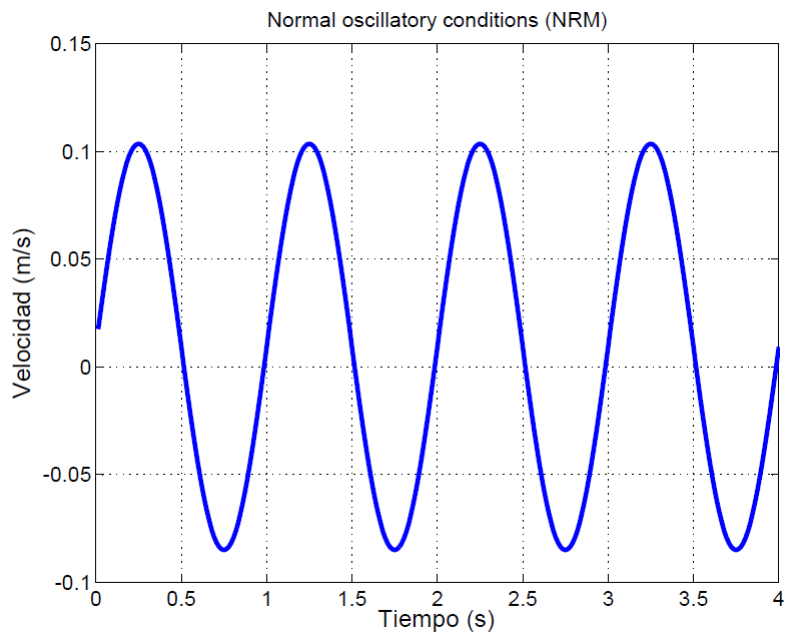


Figura 3.15- Composición de velocidades, flujo oscilatorio más flujo neto (NRM)

$$f=1\text{Hz} \quad Re_n=230 \quad x_o = 15$$

3.5.2. Abnormal oscillatory conditions (ANB)

Análogamente al caso anterior, *abnormal oscillatory conditions* está formado por una componente neta y una oscilatoria. En este caso la componente oscilatoria no es una senoidal pura sino que tiene la siguiente forma.

$$u(t) = u_{net} + u_{osc}$$

$$u_{osc} = \begin{cases} 2\pi f_1 x_0 \sin(2\pi f_1 t) & t \leq \frac{1}{2f_1} \\ 2\pi f_2 x_0 \sin\left(2\pi f_2 t + \pi\left(1 - \frac{f_2}{f_1}\right)\right) & \frac{1}{2f_1} < t \leq \Delta t \end{cases}$$

$$f = \frac{1}{\frac{1}{2 * f_1} + \frac{1}{2 * f_2}}$$

$$\frac{f_1}{f_2} = 3$$

Donde f se tomará la frecuencia del caso NRM para que ambos casos sean comparables.

En la Figura 3.16 se muestra como varía la velocidad en la entrada del OBR en función del tiempo para el caso *Abnormal oscillatory conditions*.

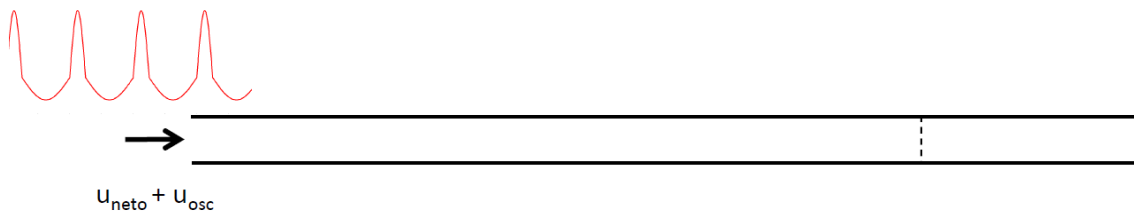


Figura 3.16- Composición de velocidades. Abnormal oscillatory conditions(ABN)

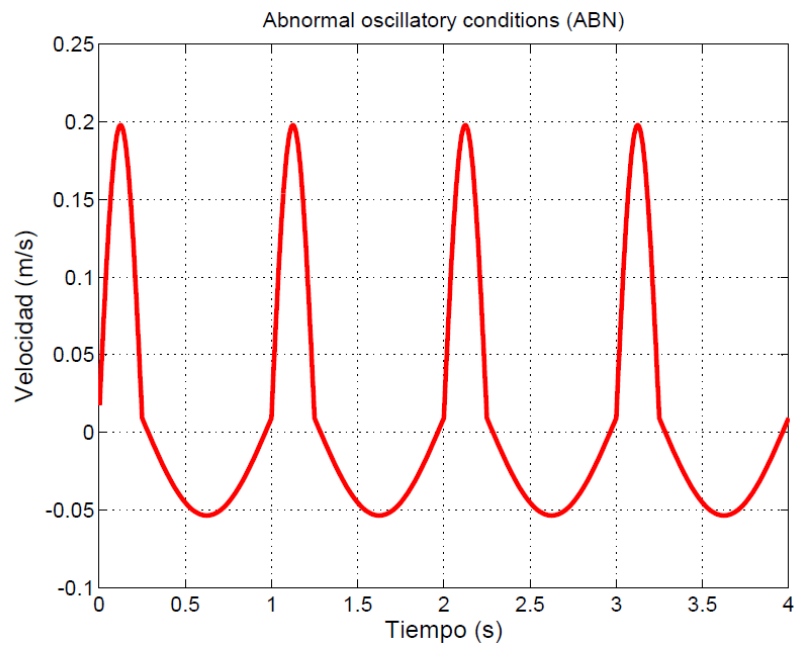


Figura 3.17- Composición de velocidades, flujo oscilatorio más flujo neto (ABN)

$$f_1 = 2\text{Hz} \quad f_2 = 0.67\text{Hz} \quad Re_n=230 \quad x_o = 15 \text{ mm}$$

En la Figura 3.18 se ha representando tanto la función *Normal oscillatory conditions* como la *Abnormal oscillatory conditions* ambas con una frecuencia $f = 1\text{Hz}$.

En el caso de la oscilación anormal el semiciclo positivo tiene una frecuencia $f_1 = 2\text{Hz}$ y el semiciclo negativo $f_2 = 0.67\text{Hz}$, mientras que el ciclo completo tiene una frecuencia $f = 1\text{Hz}$.

En todas las simulaciones realizadas para comparar NRM con ABN se ha utilizado la misma frecuencia de ciclo completo, mientras que se ha ido modificando la frecuencia del semiciclo positivo y semiciclo negativo.

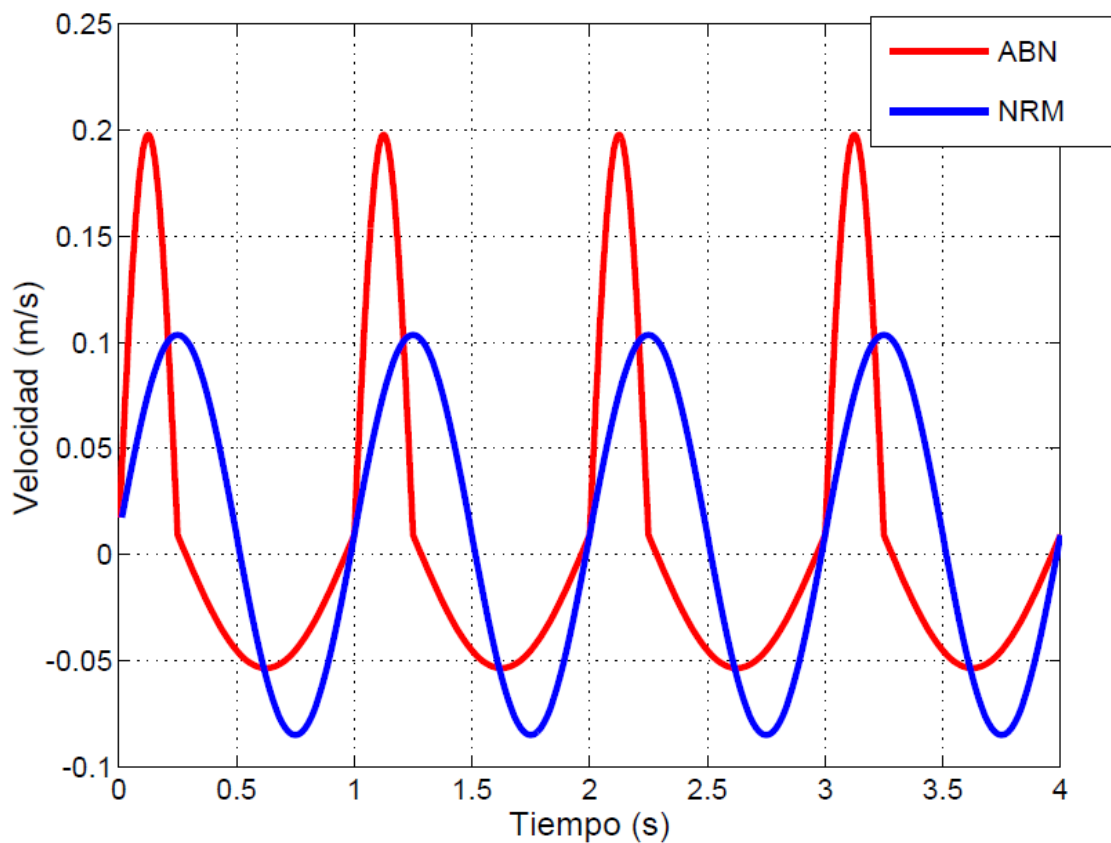


Figura 3.18- Comparación entre ABN y NRM

3.6. Condiciones de operación

El fluido de trabajo utilizado para las simulaciones es agua, con propiedades a 25°C:

- Densidad: $\rho=998,2 \text{ kg/m}^3$
- Viscosidad dinámica: $\mu=0,001003 \text{ kg/m.s}$
- Viscosidad cinemática: $\nu=1,004809 \cdot 10^{-6} \text{ m}^2/\text{s}$
- Coeficiente de autodifusión: $D_w = 2.299 \cdot 10^{-9} \text{ m}^2/\text{s}$

Los parámetros de funcionamiento del pistón encargado de originar el movimiento oscilatorio son:

- Amplitud de oscilación(x_o) (m)
- Frecuencia de oscilación (f) (Hz)
- Velocidad de oscilación (u) (m/s)

El flujo que circula por el interior del reactor estará compuesto por un **flujo neto**, caracterizado por una velocidad constante a lo largo del tiempo y un bajo número de Reynolds, sobre el que se superpone un flujo oscilatorio, cuya velocidad sigue una ley sinusoidal con el tiempo.

En la Tabla 3.1 se muestran las condiciones de operación tanto para el caso NRM como para ABN de todos los casos que se han resuelto (el caso de $f=1.5\text{Hz}$ para el caso ABN no se ha resuelto ya que el coste computacional es muy alto).

f [Hz]	x_o [mm]	Re_n	Re_o	Re_o/Re_n	St
1.5	15	230	3450	15	0.132
1	15	230	2300	10	0.132
0.5	15	230	1150	5	0.132
0.35	15	230	805	3.5	0.132
0.2	15	230	460	2	0.132

Tabla 3.1- Condiciones de operación

NRM	ABN	
f [Hz]	f_1	f_2
1	2	2/3
0.5	1	1/3
0.35	0.7	0.233
0.2	0.4	0.133

Tabla 3.2- Frecuencias estudiadas en el caso NRM y ABN

Es importante mencionar que el tiempo de cálculo depende de las condiciones de operación del problema. Si utilizamos un mismo modelo geométrico para todos los casos, el tiempo necesario para resolver el problema en un servidor de cálculo será función de las condiciones de operación que imponamos.

El problema se deberá simular durante un tiempo suficientemente largo como para que todo el trazador escape por la salida, por lo que al aumentar el Reynolds neto aumenta la velocidad con la que avanza el trazador, y por lo tanto disminuye el tiempo de cálculo, ya que la especie escapará en un menor tiempo.

Como ya se ha mencionado en apartados anteriores, el ciclo de oscilación lo discretizamos en pasos de tiempo (*time step*), es decir, para resolver un periodo de tiempo es necesario resolver "n" pasos de tiempo y por lo tanto "n" casos.

Si nuestro problema tiene una frecuencia $f=1\text{Hz}$, para avanzar un segundo será necesario resolver " n " pasos de tiempo, mientras que si la frecuencia es $f=2\text{Hz}$, para avanzar un segundo será necesario resolver " $2n$ " pasos de tiempo, duplicándose el tiempo de cálculo.

Por lo tanto el coste computacional es directamente proporcional a la frecuencia mientras que es inversamente proporcional al Reynolds neto.

3.7. Visualización de patrones de flujo e inyección de trazador.

Se ha utilizado el programa Tecplot para visualizar los patrones de flujo así como también la inyección del trazador.

3.7.1. Normal oscillatory conditions

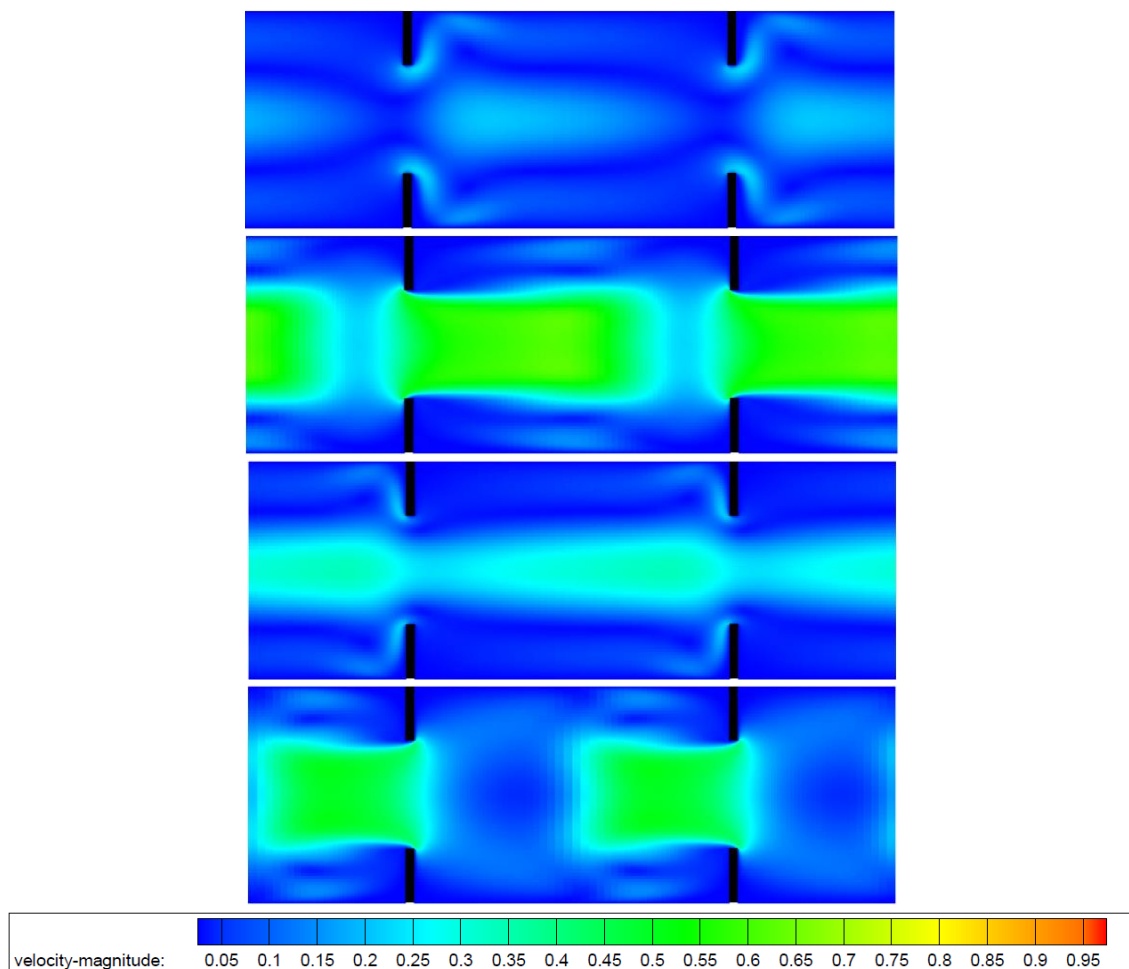


Figura 3.19- Patrones de flujo NRM $f=1\text{Hz}$, $Re_n=230$, $Re_o=2300$, $St=0.132$

En la Figura 3.19 se puede observar el patrón de flujo en el caso NRM. Se han representado para los grados 0, 90, 180, 270 que corresponden con los puntos de velocidad máxima, mínima y nula en el momento de cambio de un ciclo positivo a negativo y viceversa.

Se aprecia la generación de un chorro que se genera en un diafragma y se desplaza hasta casi alcanzar el diafragma continuo. El chorro generado en el ciclo positivo tiene una mayor intensidad, ya que está favorecido por el flujo neto, mientras que el chorro generado en el ciclo negativo tiene sentido opuesto al flujo neto.

Se pueden observar la aparición de zonas muertas en las proximidades de la pared y esquinas de los diafragmas.

3.7.2. Abnormal oscillatory conditions

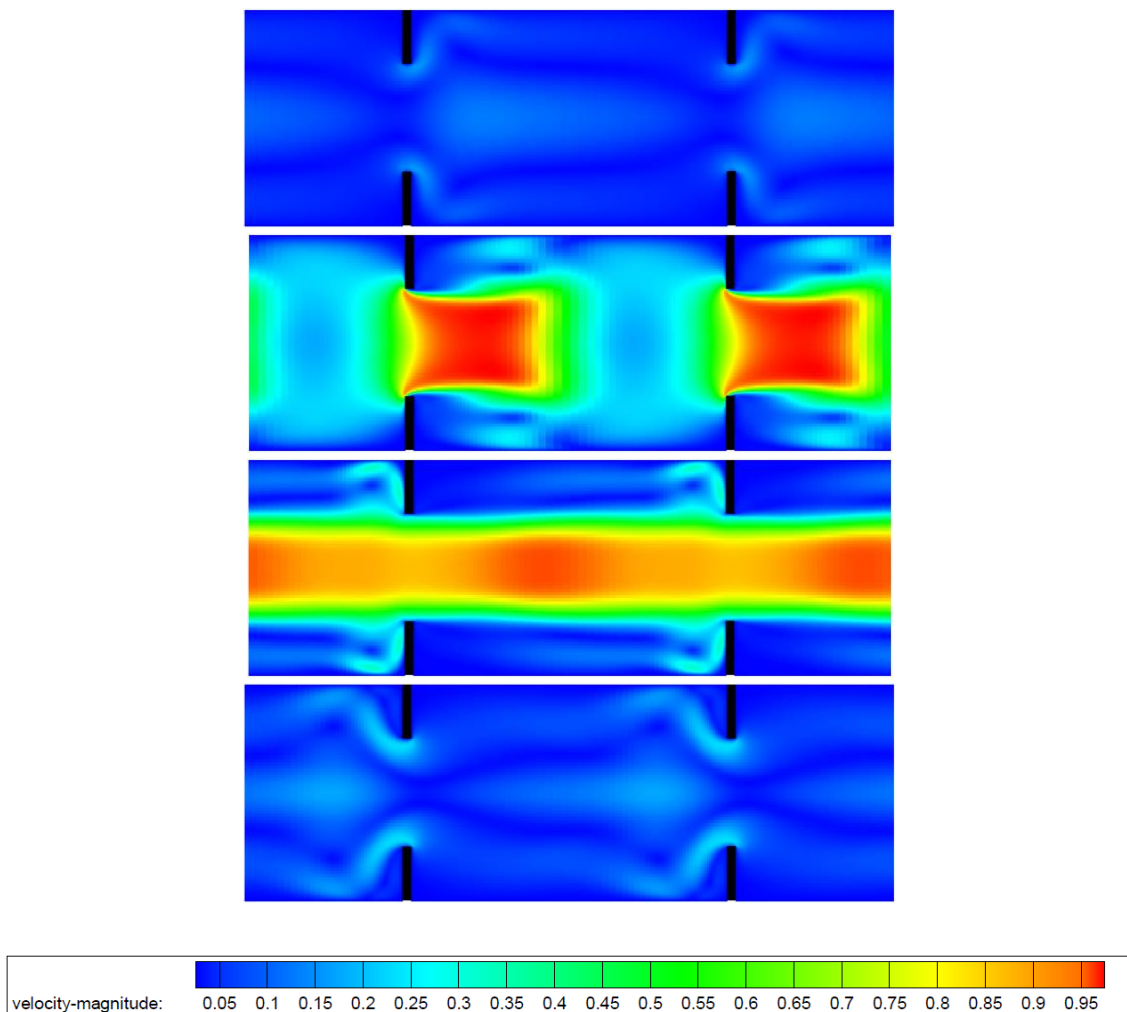


Figura 3.20- Patrones de flujo ABN $f=1\text{Hz}$, $Re_n=230$, $Re_o=2300$, $St=0.132$

En la Figura 3.20 se representan los patrones de flujo para el caso ABN en los mismos puntos que en la Figura 3.19, siendo por lo tanto comparables.

En el caso ABN tenemos velocidades pico más altas en el ciclo positivo, siendo por contra inferiores en el ciclo negativo. Esto produce la aparición de un chorro en el ciclo positivo que al contrario del caso NRM llega a sobrepasar el diafragma contiguo. En el ciclo negativo no llega a generarse un chorro apreciable aunque si se crean vorticidades que eliminan zonas muertas en zonas cercanas a la pared y esquinas de los diafragmas.

3.7.3. Visualización de la inyección

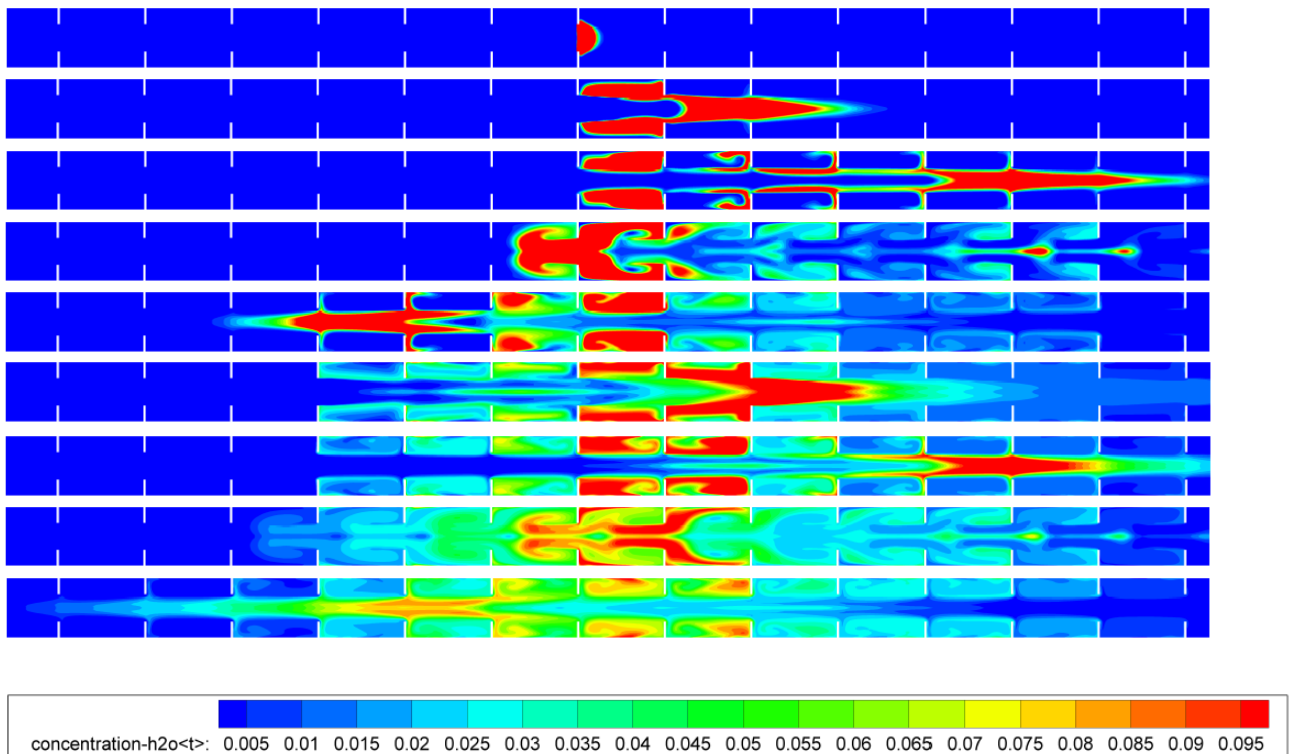


Figura 3.21- Visualización de la inyección y dispersión de la especie en el caso NRM

3.8. Resultados

3.8.1. Curvas de concentración y curvas adimensionales

En la Figura (3.22) se ha representado la fracción másica de trazador en diferentes secciones aguas abajo de la inyección. Puede observarse como estas curvas siguen una distribución Gaussiana al ir alejándonos de la zona de inyección. Si hacemos un zoom en una de las curvas puede verse como realmente la curva está formada por senoidales, haciendo presente la cantidad de pasos de tiempo que se han resuelto (ver Figura 3.23).

En posteriores resultados, para un mejor análisis, las curvas se darán adimensionalizadas, siguiendo las ecuaciones que se presentaron en () y de una única sección de referencia, en nuestro caso L14 que se encuentra a 2643,75mm aguas abajo del punto de inyección.

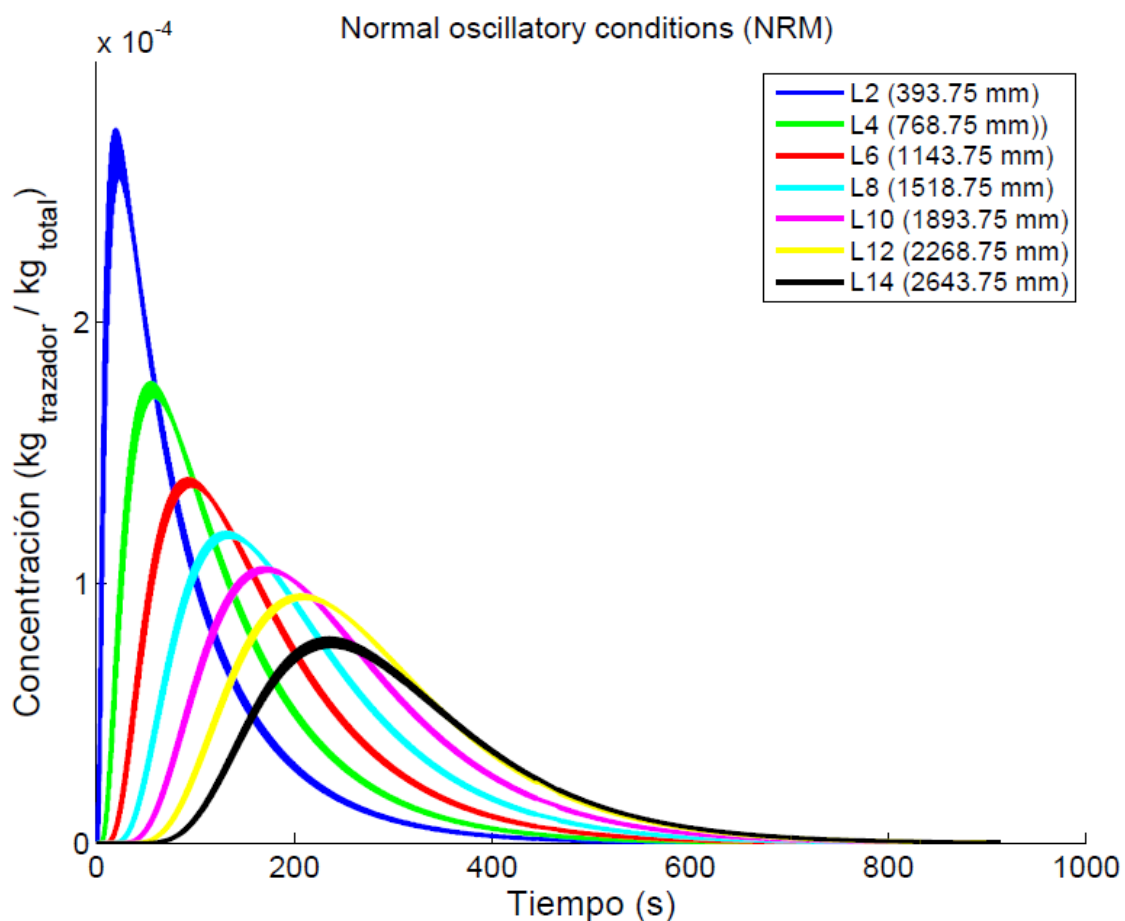


Figura 3.22- Concentración (fracción másica de trazador) en diferentes secciones aguas abajo de la inyección

($f=1\text{Hz}$, $Re_n=230$, $Re_o=2300$, $St=0.132$)

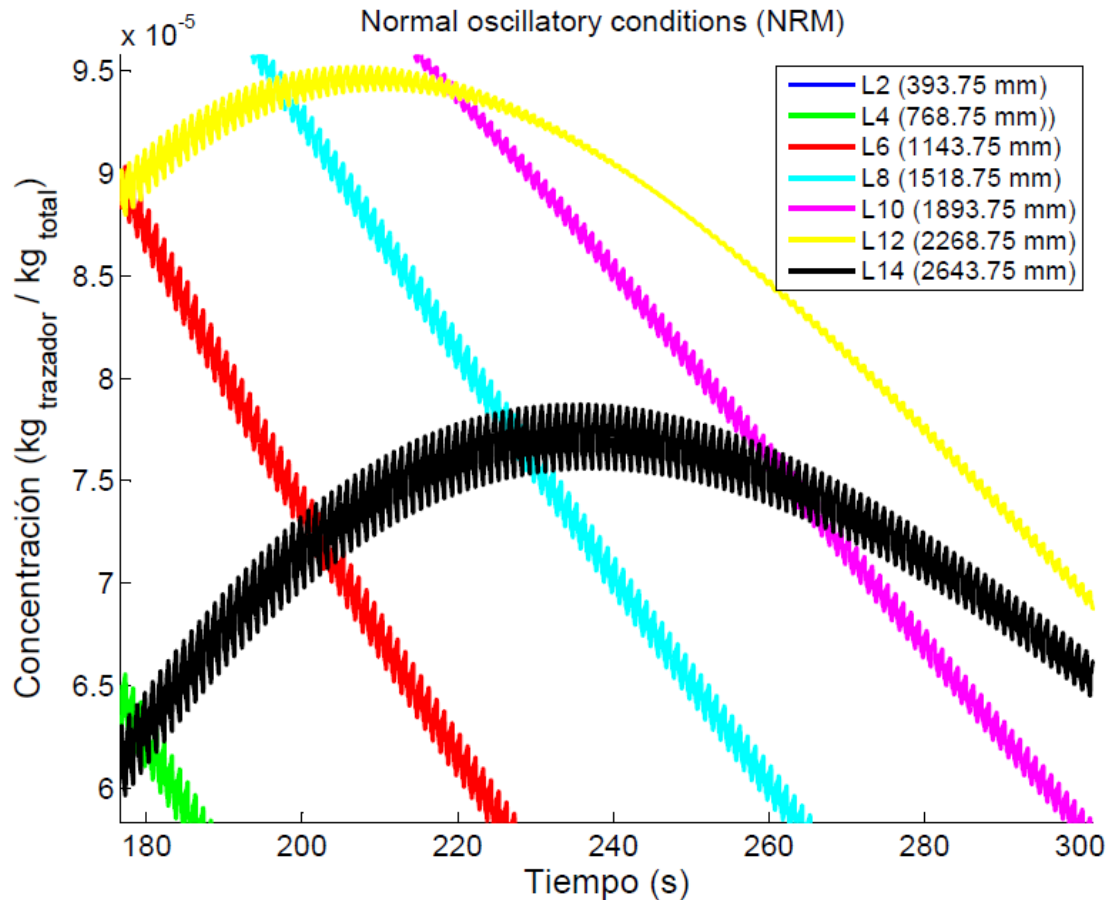


Figura 3.23- Zoom aplicado a la Figura 3.22

Una vez obtenida la concentración de trazador en diferentes secciones de nuestro reactor, estamos en disposición de obtener las curvas adimensionales mediante el procedimiento explicado en el apartado 1.5.5 Determinación de la distribución de tiempos de residencia (RTD).

En la Figura 3.24 se muestran las curvas adimensionales del caso NRM en diferentes secciones del reactor.

Es importante tener en cuenta que al ir midiendo la concentración en secciones más alejadas al punto de inyección se obtienen curvas cada vez más simétricas y centradas en $\Theta=1$.

Si queremos comparar diferentes condiciones de operación siempre deberemos comparar curvas medidas a una misma distancia del punto de inyección para que la información sea comparable.

En la Figura 3.25 se muestran las curvas de un reactor más largo para demostrar que las curvas van tomando una forma más cercanas al *flujo pistón* al alejarnos del punto de inyección.

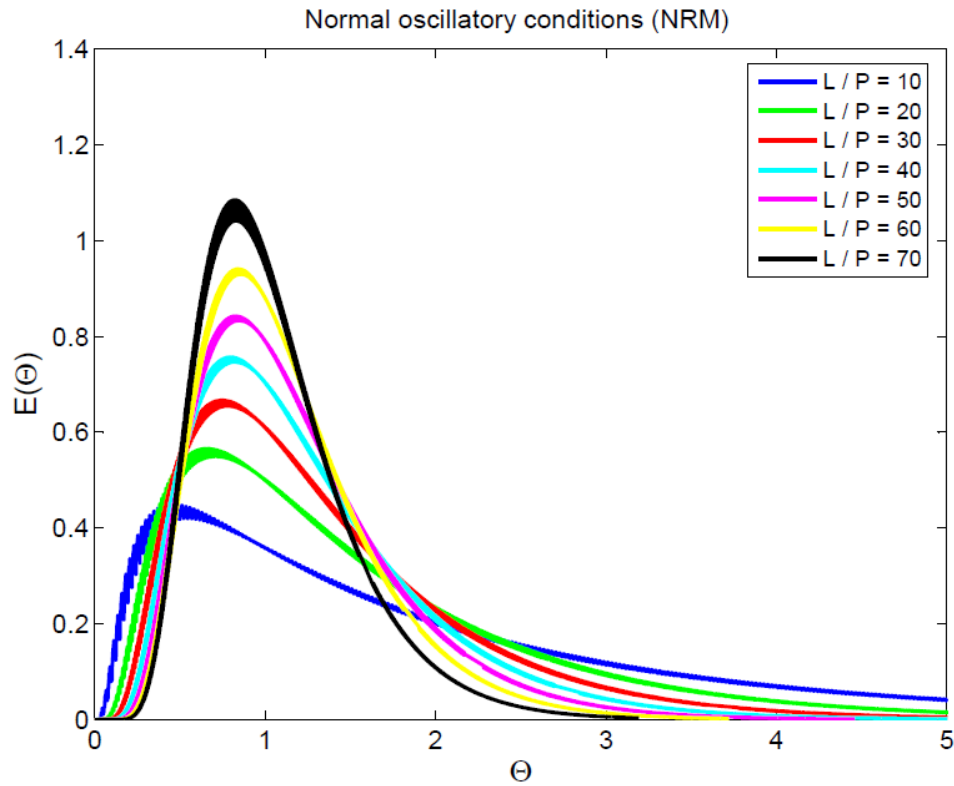


Figura 3.24- Curvas adimensionales NRM ($f=1\text{Hz}$, $Re_n=230$, $Re_o=2300$, $St=0.132$)

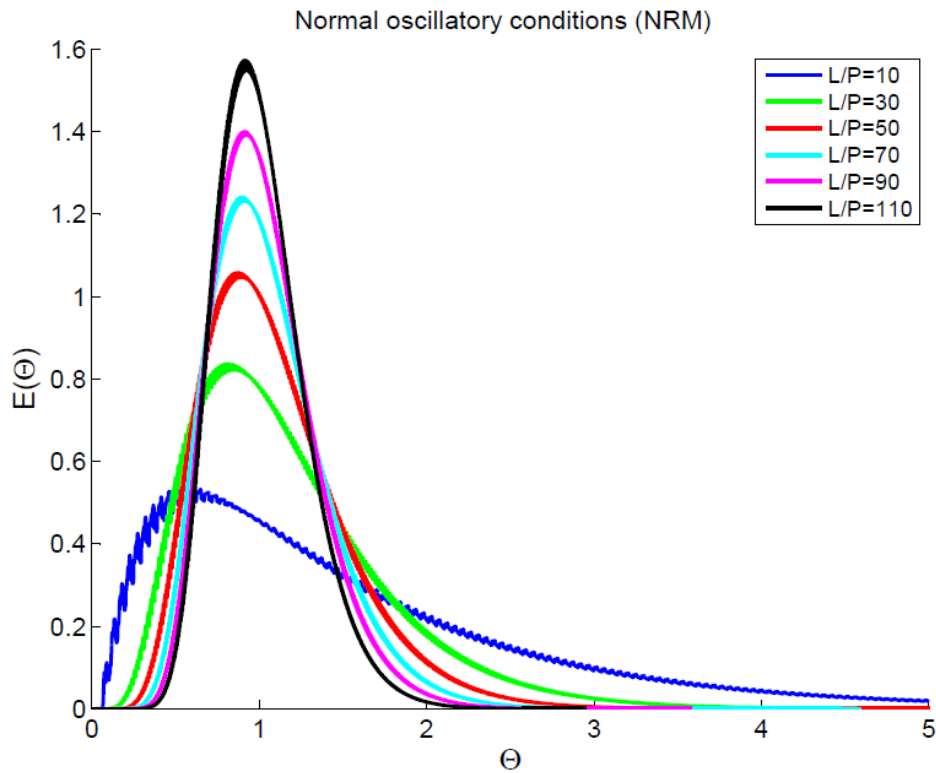


Figura 3.25- Curvas adimensionales NRM ($f=0.5\text{Hz}$, $Re_n=230$, $Re_o=1250$, $St=0.132$)

3.8.2. Normal oscillatory conditions (NRM)

En la Figura 3.26 se muestran las curvas adimensionales del caso NRM en la sección $L_{14}=2643,75\text{mm}$ ($L/P=70$) aguas abajo de la inyección para diferentes frecuencias. En todos los casos tanto $Re_n=230$ y $St=0.132$ permanece constante.

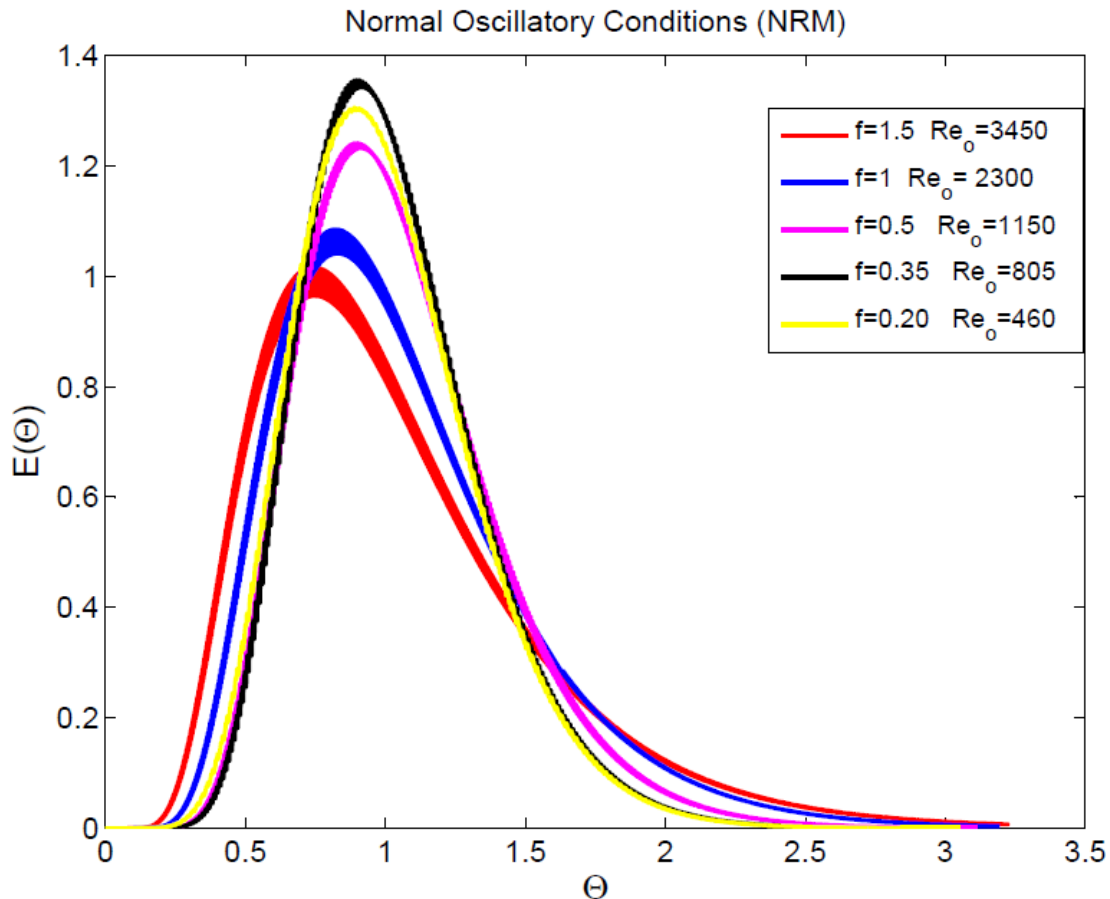


Figura 3.26- Normal oscillatory conditions $L/P=70$, $Re_n=230$, $St=0.132$

Estamos buscando la curva adimensional RTD lo más estrecha posible (con menor varianza), simétrica y centrada en $\Theta=1$.

De todas las curvas mostradas en la Figura 3.26 obtenemos un óptimo para $f=0.35\text{Hz}$ y una relación $Re_o/Re_n=3.5$.

Podemos concluir diciendo que para frecuencias $f>0.35\text{Hz}$ la relación $Re_o/Re_n>3.5$, aumentando la dispersión axial y por tanto obteniendo curvas simétricas pero más anchas con una mayor varianza. Para frecuencias $f<0.35\text{Hz}$ la relación $Re_o/Re_n<3.5$ generándose mayores zonas muertas que dificultan el avance de la especie produciendo curvas con mayores colas y asimétricas.

3.8.3. Abnormal oscillatory conditions (ABN)

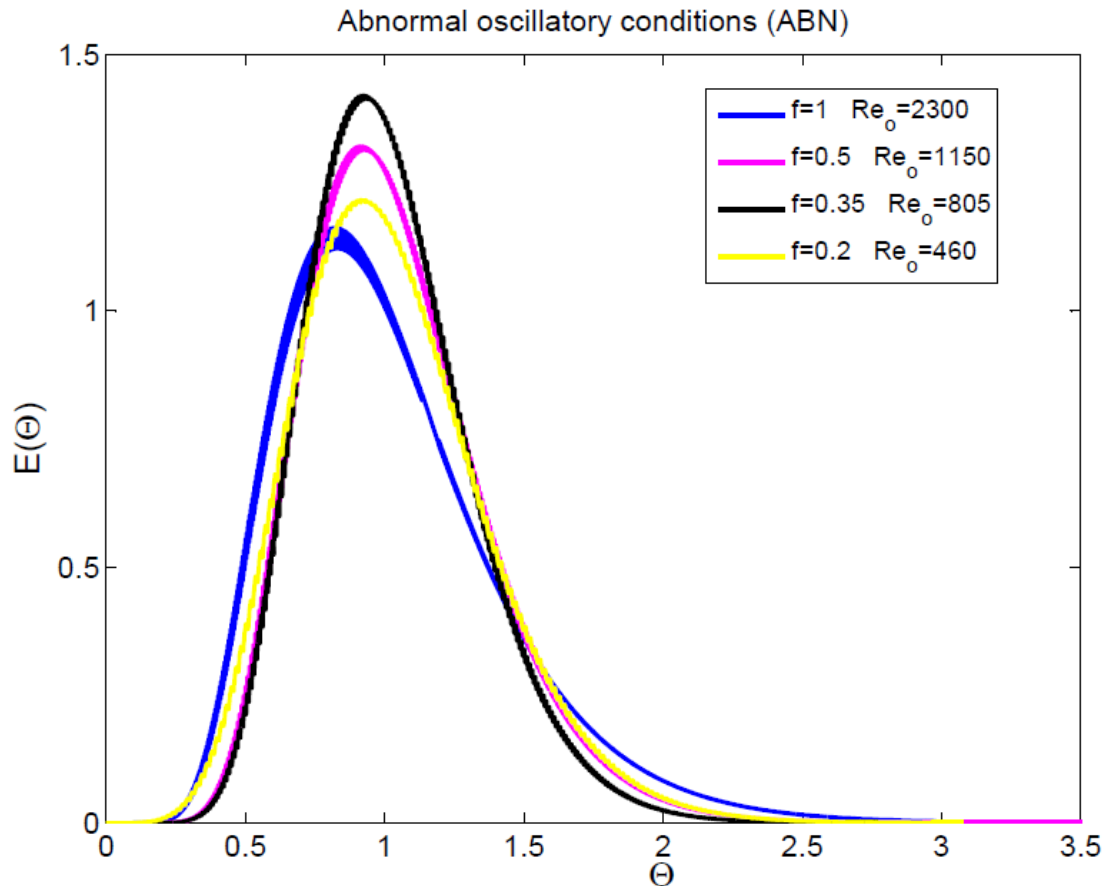


Figura 3.27- Abnormal oscillatory conditions $L/P=70$, $Re_n=230$, $St=0.132$

En la Figura 3.27 se ha procedido de igual modo que en apartado anterior, y se observa que al igual que con el caso NRM se obtiene un óptimo para una frecuencia $f=0.35\text{Hz}$.

3.8.4. Comparación entre NRM y ABN

El objetivo de implementar una oscilación de flujo anormal (ABN), es mejorar la curva RTD. Para valorar que tipo de oscilación genera mejores resultados se representarán ambas curvas para unas mismas condiciones de operación.

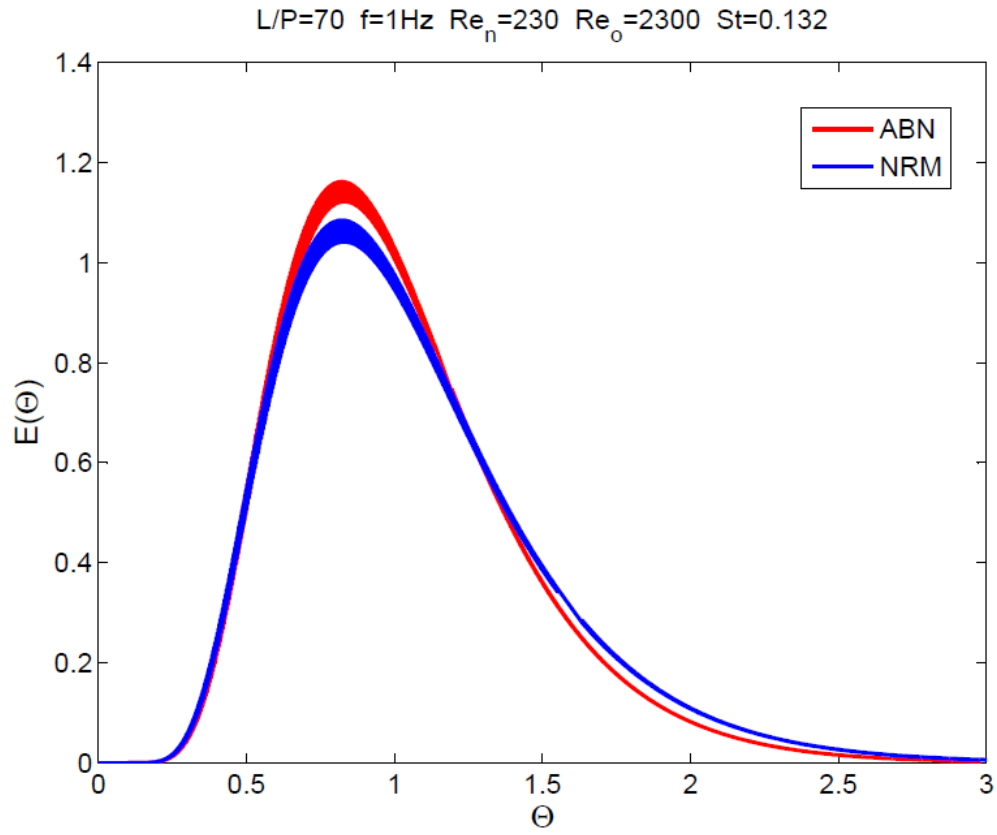


Figura 3.28- Comparación entre NRM y ABN para $L/P=70$, $f=1\text{Hz}$, $Re_n=230$, $Re_o=2300$, $St=0.132$

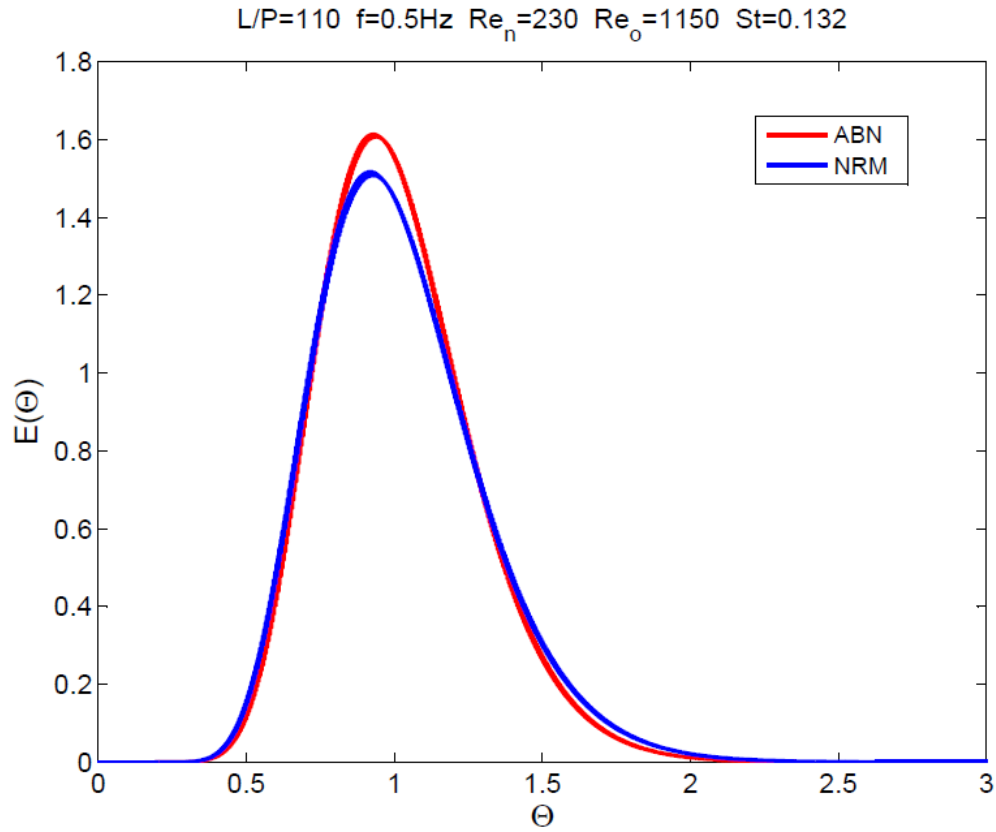


Figura 3.29- Comparación entre NRM y ABN para $L/P=110$, $f=0.5\text{Hz}$, $Re_n=230$, $Re_o=1150$, $St=0.132$

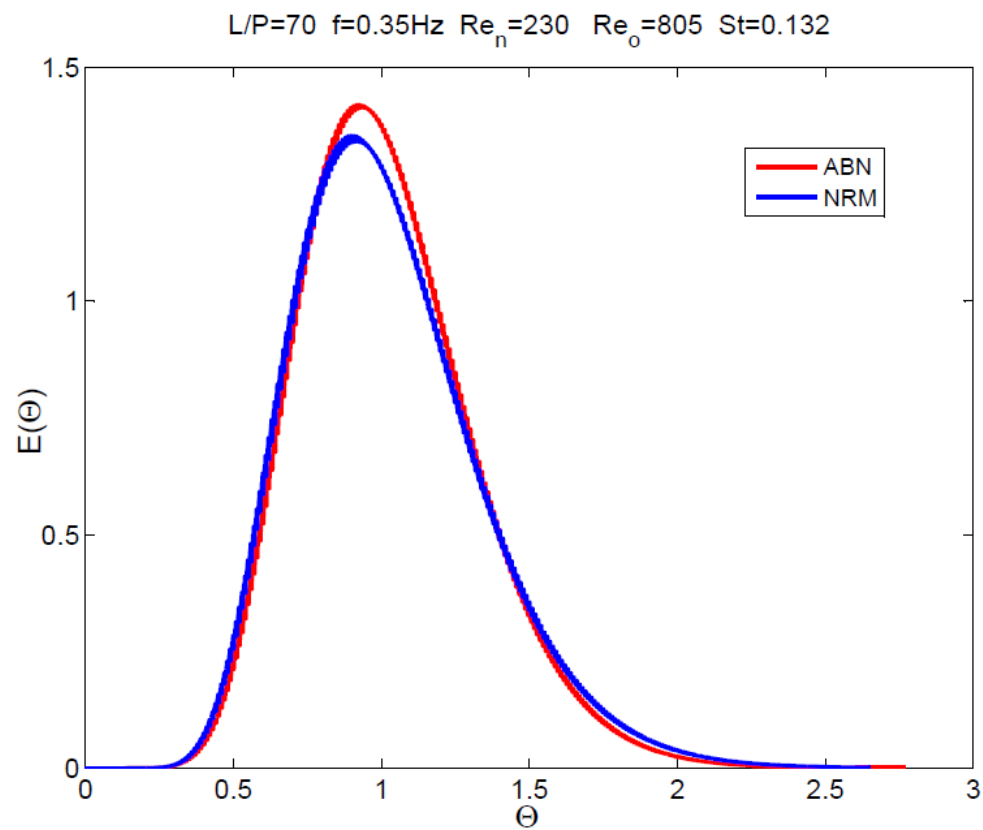


Figura 3.30- Comparación entre NRM y ABN para $L/P=70$, $f=0.35\text{Hz}$, $Re_n=230$, $Re_o=805$, $St=0.132$

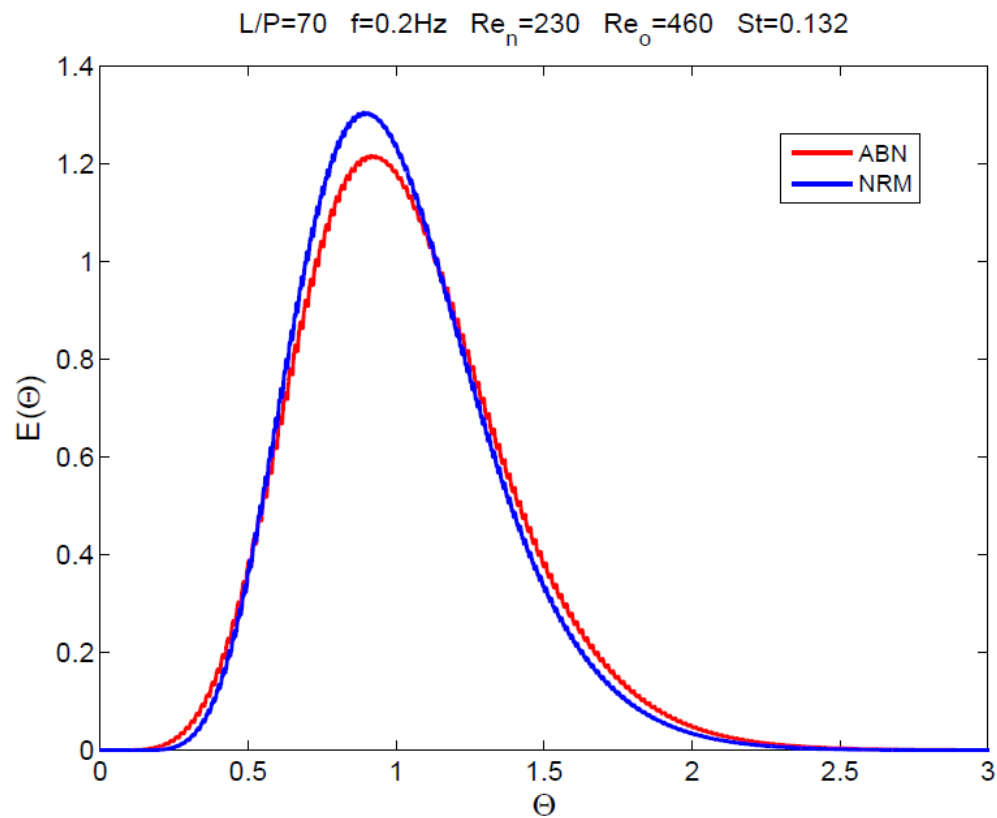


Figura 3.31- Comparación entre NRM y ABN para $L/P=70$, $f=0.2\text{Hz}$, $Re_n=230$, $Re_o=460$, $St=0.132$

En las Figuras 2.28, 3.29, 3.30 y 3.31 se observa como el **abnormal oscillatory conditions** (ABN) genera unas curvas RTD adimensionales mas simétricas y con menos colas que el caso NRM.

Podemos explicar la mejora de este tipo de flujo oscilatorio observando el patrón de flujo (ver Figura), ya que éste tiene un menor número de zonas muertas en las proximidades de la pared y esquinas de los diafragmas.

Los ciclos positivos con velocidades superiores permiten hacer que avance la especie escapando de las zonas muertas, mientras que en los ciclos negativos con velocidades negativas inferiores genera el mezclado sin demasiada dispersión axial y evitando la aparición de colas en la parte derecha de las gráficas RTD.

La mejora aunque visible no es del todo significativa, pudiéndonos plantear la dificultad añadida que supone la generación de este tipo de flujo para la mejora conseguida.

En cualquier caso no es objetivo de este PFC estudiar la viabilidad o no de ejecutar este tipo de flujo oscilatorio, sino estudiar su comportamiento.

BLOQUE III:

Deflectores móviles

Capítulo 4: Estudio de OBR con deflectores móviles

4.1. Definición del dominio computacional

El problema fluido dinámico que se plantea en este Bloque III, es el estudio del proceso de mezclado en un reactor en la que la oscilación es ejercida sobre los deflectores, que son desplazados axialmente por la actuación del pistón. Al igual que para la oscilación del fluido, dispondremos de un flujo neto que arrastrará el frente de trazador desde el punto de inyección hasta la salida. En este caso la componente oscilatoria del flujo no existe, y son las leyes de **desplazamiento de los deflectores** (*baffles*) las que gobiernan el movimiento.

El proceso de mezclado al igual que en el Bloque II se estudiará mediante la inyección de un pequeño volumen de **trazador** en el interior del reactor. La distribución de trazador será analizada como una función del tiempo en una localización axial determinada.

El reactor al igual que en el Bloque II estará formado por 110 pasos, e inyectaremos y mediremos la concentración en los mismos puntos, con la finalidad de obtener resultados comparables (ver Figura 4.1).

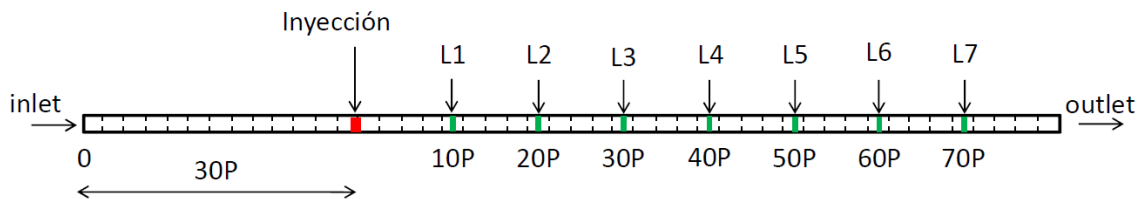


Figura 4.1- Punto de inyección y de medición de la concentración.

4.2. Geometría estudiada

La geometría del problema a resolver está compuesta por un conducto liso de sección transversal circular de diámetro $D = 25 \text{ mm}$ en el que se insertan, equiespaciados una distancia $L = 37,5 \text{ mm}$, una serie de discos de diámetro exterior $D_1 = 23 \text{ mm}$ con orificio interior $D_0 = 11,5 \text{ mm}$ y espesor $e = 1 \text{ mm}$, quedando una distancia $g = 1 \text{ mm}$ entre los discos y el conducto (ver Figura 4.2).

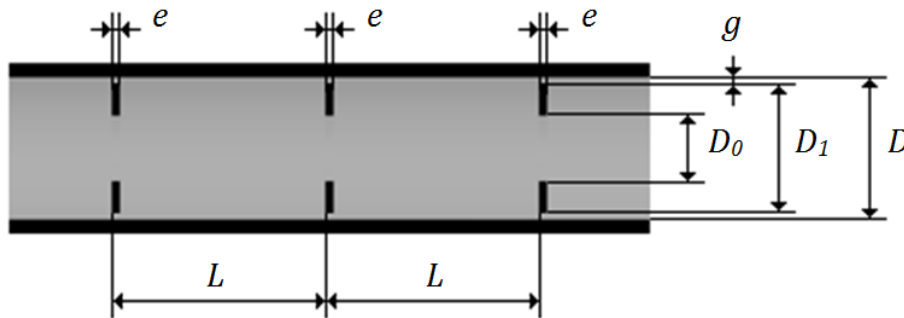


Figura 4.2- Geometría del reactor de diafragmas oscilatorios

La periodicidad geométrica que existe en la dirección longitudinal, permite definir un paso espacial como la región de conducto de longitud L centrada en torno a uno de los discos insertados (ver Figura 4.3).

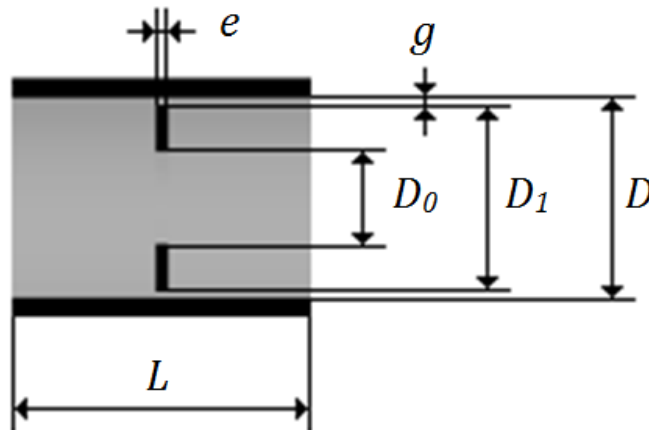


Figura 4.3- Paso espacial en el reactor de diafragmas oscilatorios

En el modelo 2D, gracias a la simetría axial de la geometría, el dominio computacional se reduce a la mitad de la sección longitudinal de un paso espacial (ver Figura 4.4).

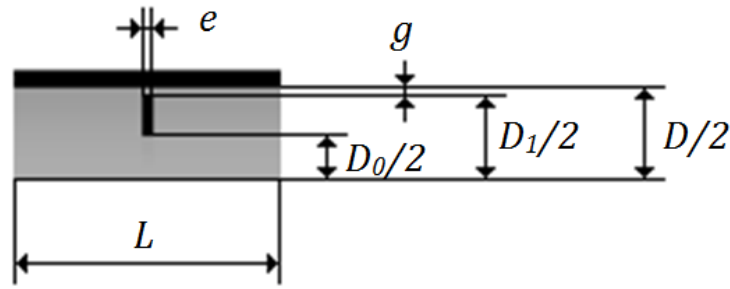


Figura 4.4- Dominio computacional de un paso del modelo 2D

Nótese que la definición del dominio computacional que se hace para este Bloque III es equivalente a la hecha para el Bloque II, con la única diferencia de la holgura que existe entre el disco y conducto.

4.3. Metodología de simulación

La metodología de simulación que se aplica en la resolución del campo de velocidades y del transporte de especies con la configuración de oscilación de los discos (Bloque III) es similar a la aplicada con la configuración de oscilación del fluido (Bloque II). A continuación se muestran las diferencias entre ambas metodologías.

Las leyes de gobierno del movimiento de los discos son leyes sinusoidales temporales.

$$u_b(t) = u_{b0} \sin(2\pi f t + \varphi)$$

En este caso el flujo neto vendrá dado por un gasto constante a la entrada, impuesto como una velocidad (V_{inlet}) (ver Figura 4.5).



Figura 4.5 Modelo del OBR con diafragmas móviles

Al igual que para la oscilación del fluido (Bloque II), se inicia el ciclo de oscilación en condiciones de reposo, para $\varphi = 0$, es decir, con velocidad del disco nula, por considerar que esta situación reproduce mejor el fenómeno real. Así, la ley temporal sinusoidal para la velocidad del disco se expresa como:

$$u_b(t) = 2\pi f x_0 \sin(2\pi f t)$$

En la Figura 4.6 se representa la evolución de la velocidad del disco, partiendo del caso estacionario con gasto másico constante:

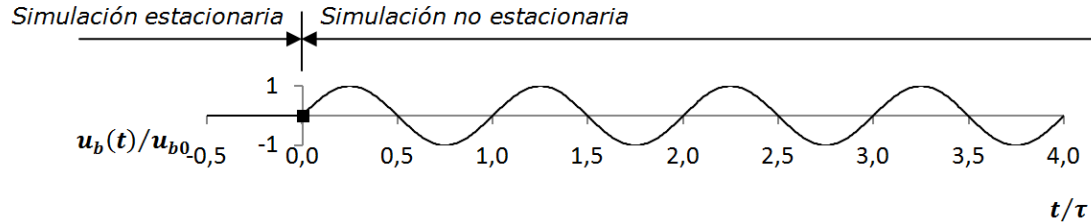


Figura 4.6- Simulación estacionaria y simulación no estacionaria

A partir del caso de inicio del ciclo comienza la **simulación no estacionaria**, con velocidad de disco variable en el tiempo. Para ello es preciso discretizar la ecuación siguiente imponiendo un paso de tiempo en el eje temporal, que se obtiene mediante la condición de **Courant-Friedrich-Levy** (condición CFL).

$$\Delta t \frac{u}{\Delta x} \leq C$$

siendo Δt el paso de tiempo, Δx el tamaño de la celda en dirección axial, u la velocidad en la celda de tamaño Δx y C el número de Courant.

Es importante mencionar que para el caso de **Malla Deformable**, con el paso de tiempo que satisface la condición CFL, se han encontrado problemas de convergencia durante la simulación asociados al movimiento de la malla dinámica dentro del dominio computacional. Dichos problemas obligan a la determinación de un paso de tiempo válido mediante un proceso de **prueba y error**.

4.3.1. Periodicidad temporal

En la simulación no estacionaria, que comienza a partir del caso inicial de la simulación estacionaria, se produce un transitorio que ha de superarse hasta alcanzar una solución periódica en el tiempo. Es decir, existe un número determinado de ciclos temporales al comienzo de la simulación no estacionaria en los que la solución difiere de un ciclo a otro. Este periodo se denomina **simulación transitoria**. Una vez superado el transitorio se alcanza la periodicidad temporal, comenzando el periodo denominado **simulación periódica temporal**.

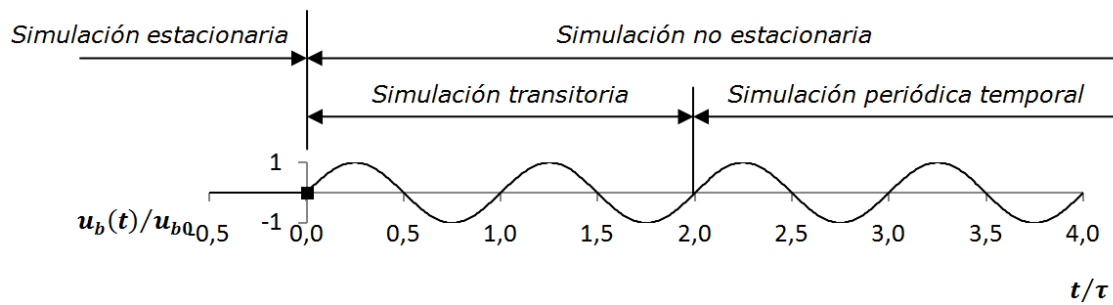


Figura 4.7- Simulación transitoria y simulación periódica temporal

4.3.2. Periodicidad espacial.

La geometría del reactor de flujo oscilatorio se compone de un determinado número de pasos espaciales consecutivos, centrados en los discos insertados. Esta **periodicidad geométrica** se traduce en una **periodicidad espacial** de la solución numérica dentro del dominio computacional, ya que el patrón de movimiento del flujo ha de ser el mismo en cada uno de los pasos espaciales, salvando las inestabilidades propias de la turbulencia.

4.4. Condiciones de operación

El fluido de trabajo utilizado para las simulaciones es agua, con propiedades a 25°C:

- Densidad: $\rho=998,2 \text{ kg/m}^3$
- Viscosidad dinámica: $\mu=0,001003 \text{ kg/ms}$
- Viscosidad cinemática: $\nu=1,004809 \cdot 10^{-6} \text{ m}^2/\text{s}$
- Coeficiente de autodifusión: $D_w = 2.299 \cdot 10^{-9} \text{ m}^2/\text{s}$

Los parámetros de funcionamiento del pistón encargado de originar el movimiento oscilatorio son:

- Amplitud de oscilación (x_o) (m)
- Frecuencia de oscilación (f) (Hz)
- Velocidad de oscilación (u) (m/s)

f [Hz]	x_0 [mm]	Re_n	Re_o	Re_o/Re_n	St
1.5	15	230	3450	15	0.132
1	15	230	2300	10	0.132
0.5	15	230	1150	5	0.132
0.35	15	230	805	3.5	0.132
0.2	15	230	460	2	0.132

Tabla 4.1- Condiciones de operación. Deflectores móviles.

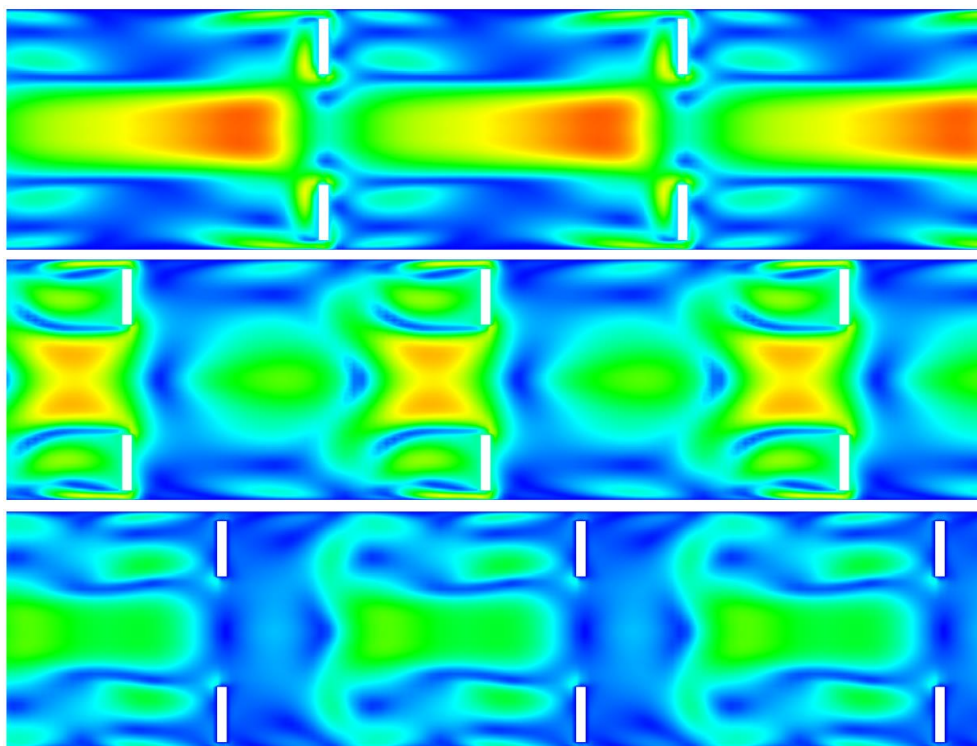
4.5. Metodologías de resolución

Para resolver el OBR-MB (deflectores móviles) se han utilizado dos metodologías con el fin de comprobar si son válidas para resolver el transporte de especies.

-Moving Reference Frames (MRF)

-Malla Deformable (MD)

4.6. Patrones de flujo e inyección de especies



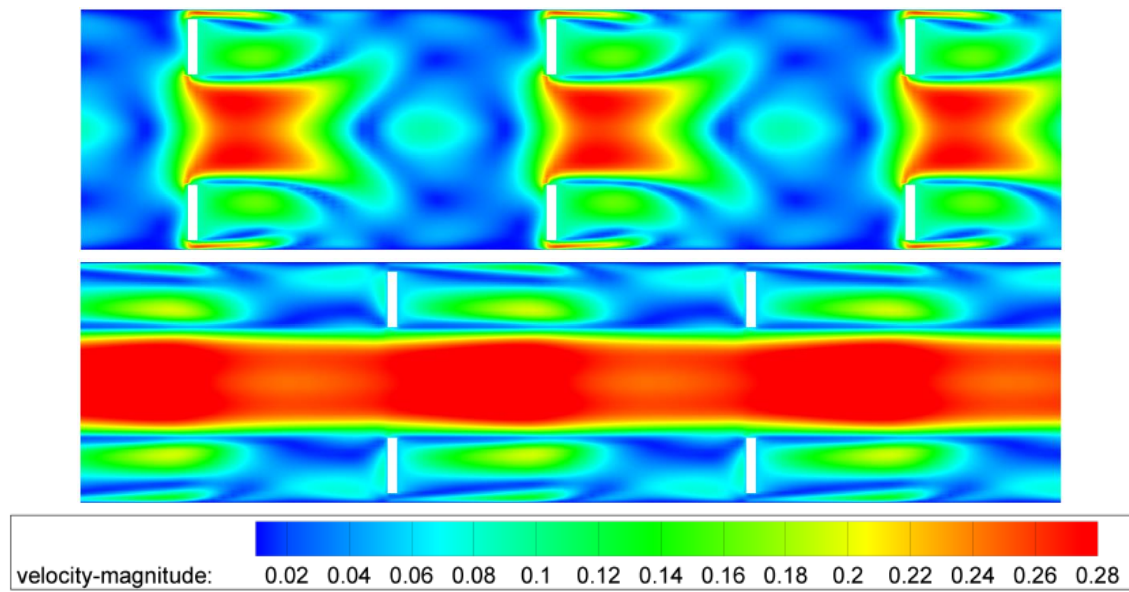
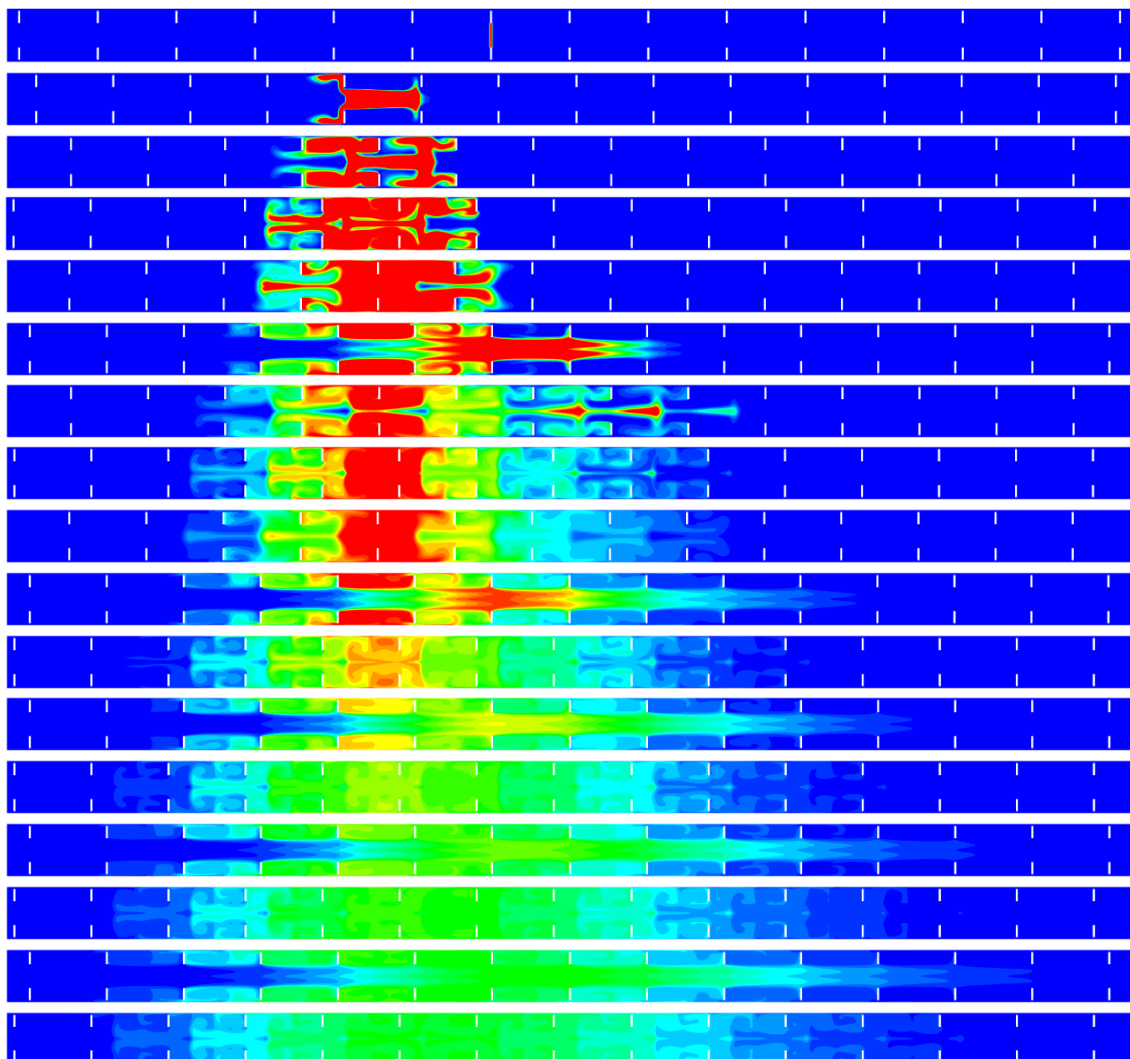


Figura 4.8 -Patrones de flujo en un OBR con deflectores móviles [16]



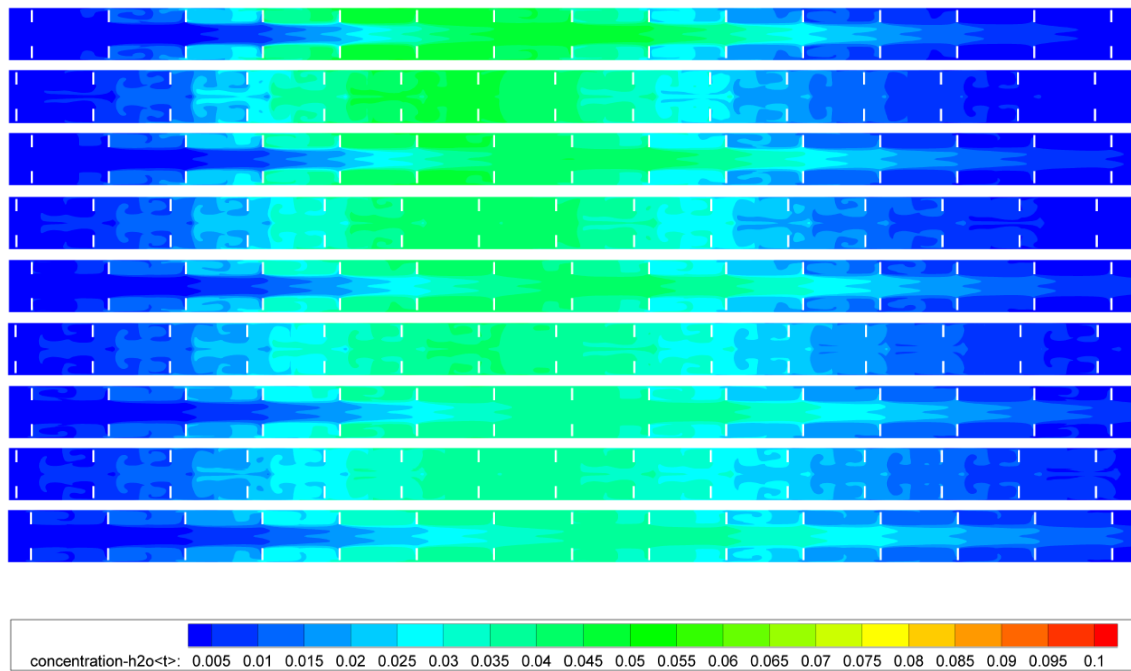


Figura4.9- Inyección y dispersión de un trazador en un OBR con deflectores móviles [16]

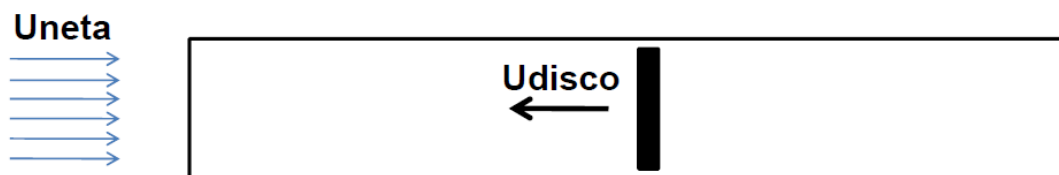
Capítulo 5: Moving Reference Frame

En este capítulo modelizaremos un OBR con deflectores móviles, utilizando la metodología de **Moving Reference Frame** (MRF), mientras que en el Capítulo 6 se estudiará el mismo caso pero con la metodología de *Malla Deformable* (MD)

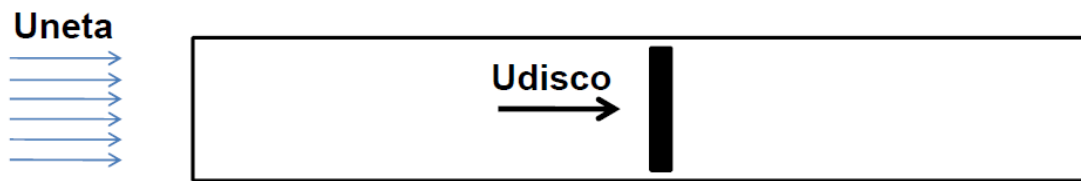
5.1. Metodología Moving Reference Frame

Para implementar la metodología *Moving Reference Frame* con el fin de resolver el caso OBR con deflectores oscilatorios, debemos modificar las condiciones de contorno. Se explicarán los pasos que difieren de el caso OBR con deflectores fijos.

Dependiendo del sentido de movimiento del disco, tendremos dos casos.



$$\begin{aligned} V_{\text{fluido}} &= - U_{\text{disco}} \\ V_{\text{pared}} &= U_{\text{disco}} \end{aligned}$$



$$\begin{aligned} V_{\text{fluido}} &= U_{\text{disco}} \\ V_{\text{pared}} &= -U_{\text{disco}} \end{aligned}$$

Figura 5.1- Condiciones de contorno en Moving Reference Frame

Tanto la velocidad V_{fluido} , como V_{pared} deberán ser introducidas como condiciones de contorno, mientras que la velocidad del disco será nula. Esto es así porque la versión utilizada en Fluent no permite aplicar movimiento a superficies normales al flujo. Sí sería posible, por el contrario, si se tratara de superficies tangenciales, como es el caso de una varilla concéntrica moviéndose en el interior de un conducto.

1. **Define > Model > Solver...** Deberá estar seleccionado *Velocity Formulation Absolute*

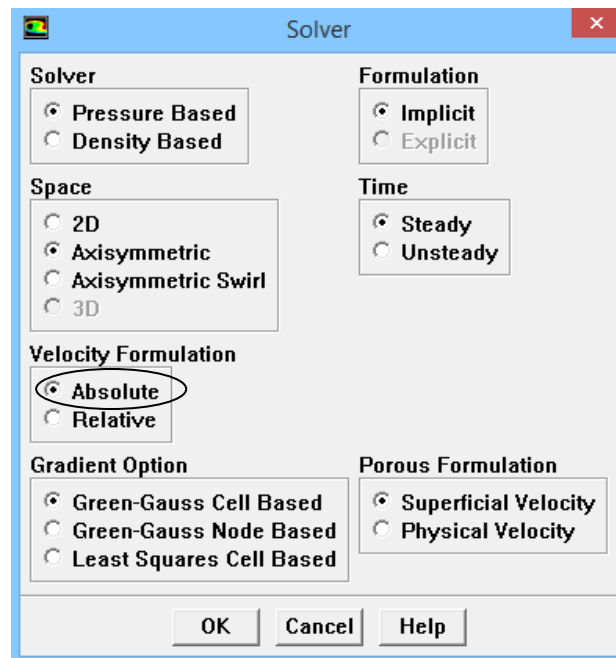


Figura 5.2- Solver

2. **Condición de contorno a la entrada del conducto:** Se tiene un perfil de velocidades uniforme, por lo que se emplea una condición de contorno de tipo

velocity inlet (magnitude normal to boundary). El valor de la velocidad a introducir depende del número de Reynolds neto que se está simulando.

Define > Boundary Conditions

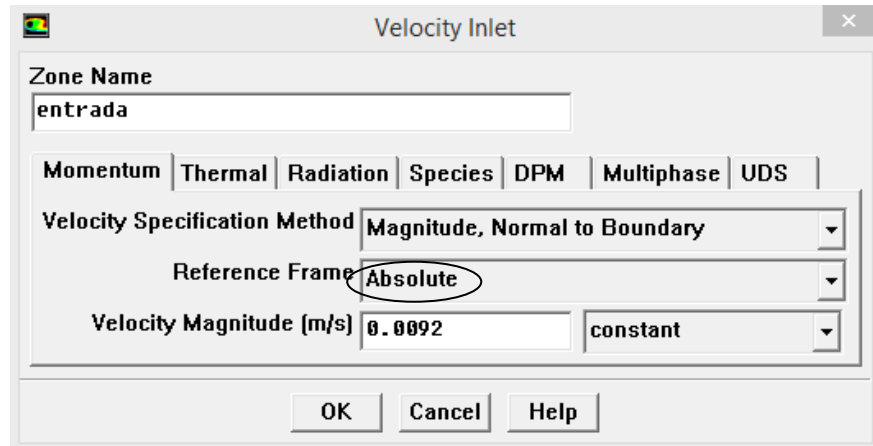


Figura 5.3- Condición de contorno a la entrada del tubo (Velocity Inlet)

En la pestaña *Reference Frame* se seleccionará **Absolute** y en *Velocity Magnitude* se incluirá la velocidad neta del flujo.

3. **Condición de contorno a la salida del conducto:** Se emplea una condición de contorno de tiempo *Pressure outlet*.
4. **Condición de contorno para la pared del conducto:** Debido a que Fluent no puede dar movimiento a superficies perpendiculares al flujo, es necesario establecer otras condiciones de contorno que permitan obtener las mismas condiciones de flujo sin tener que dotar de velocidad a los discos. El movimiento de los deflectores se sustituirá por un movimiento de la pared del conducto y el fluido en su conjunto.

Define > Boundary Conditions > Pared del tubo

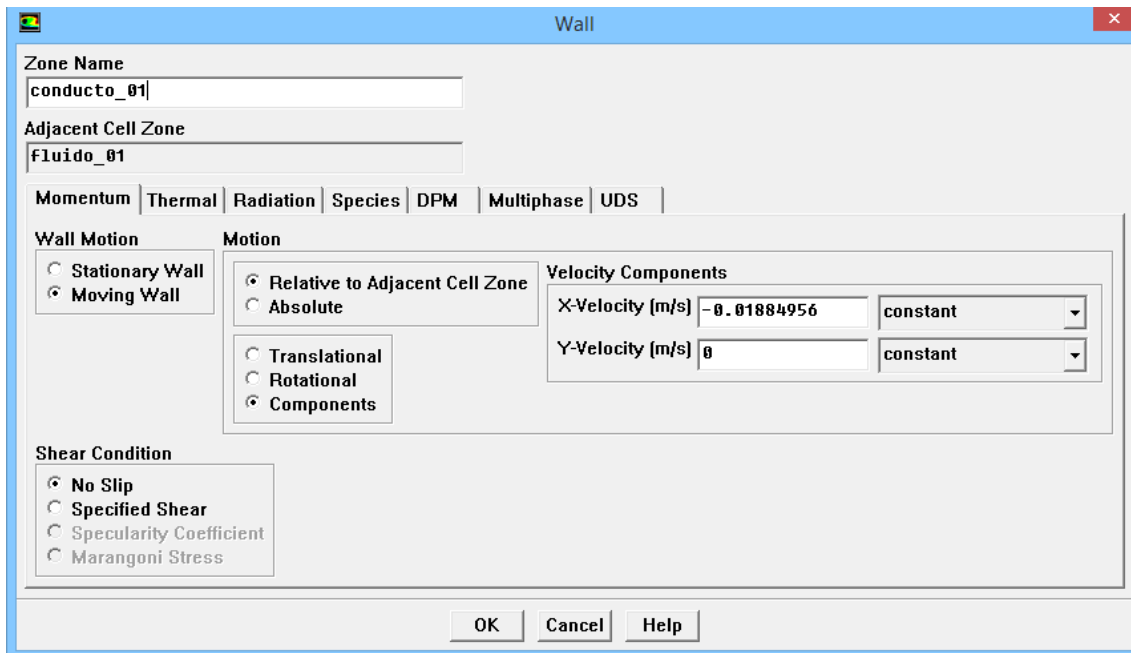


Figura 5.4- Condición de contorno en la pared del tubo (Wall)

Se debe seleccionar en *Wall Motion* **Moving Wall**, *Motion* **Relative to Adjacent Cell Zone**. Y en la componente X-Velocity se incluirá la V_{pared} .

5. **Condición de contorno para el fluido del conducto:** Como se ha dicho, para resolver el problema es necesario dotar al fluido en su conjunto de movimiento.

Define > Boundary Conditions > Volumen Fluido

Para ello Fluent permite seleccionar la opción *Moving Reference Frame*, mediante la cual se introduce el valor de la componente X de velocidad.

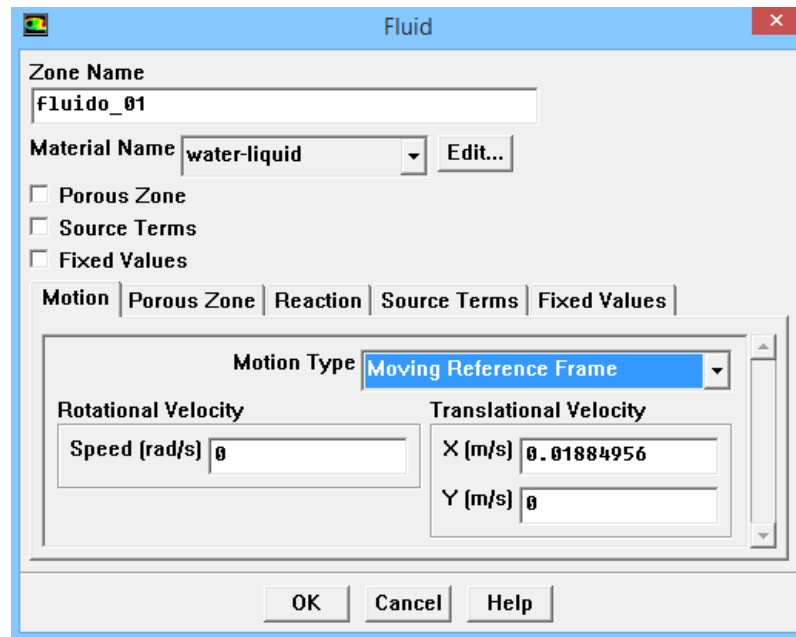


Figura 5.5- Condición de contorno en el fluido (Fluid)

Deberá realizarse este paso en todos los volúmenes fluidos incluido el volumen trazador.

En *translational Velocity* se introducirá V_{Fluido} .

6. **Condición de contorno para el disco:** Aunque parezca incoherente la velocidad del disco será nula.

Define > Boundary Conditions > Disco

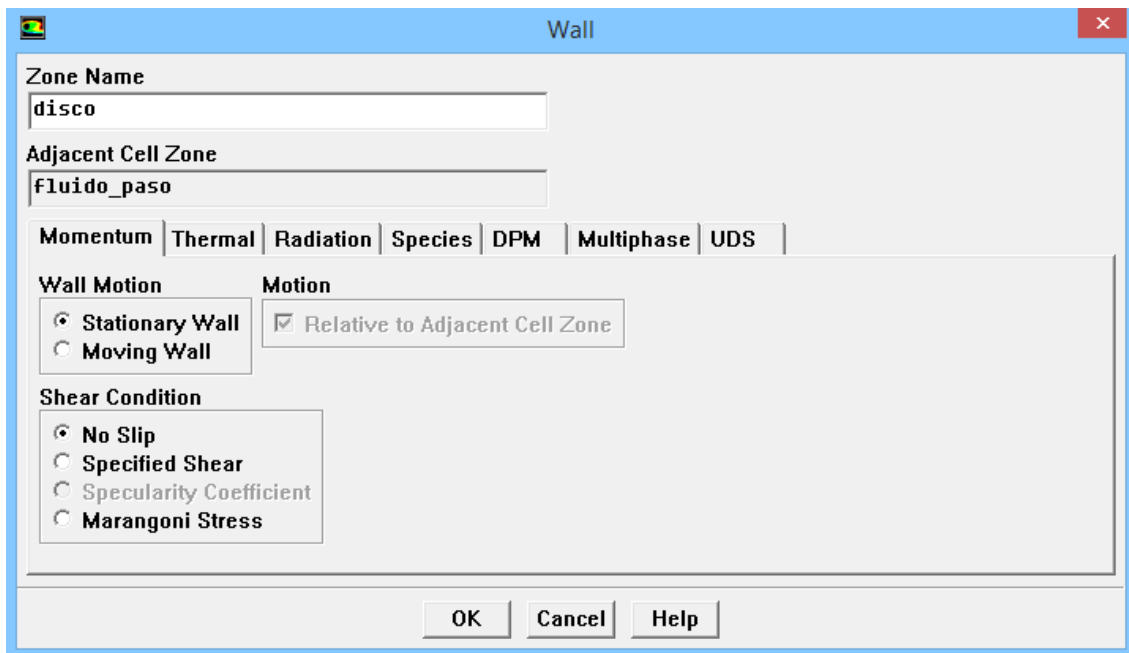


Figura 5.6- Condición de contorno para el disco (Wall)

5.2. Análisis de la metodología MRF

La metodología *Moving Reference Frame* empleada para resolver el movimiento de las placas se ha extrapolado de [17].

En esta publicación la metodología MRF se utiliza para mover las palas de un rascador. Los resultados obtenidos fueron validados experimentalmente por velocimetría láser, concluyendo que MRF modeliza correctamente el flujo en conductos con elementos móviles insertados.

Se ha llevado un acabo un análisis de los resultados obtenidos, tanto de los patrones de flujo como de la dispersión de la especie y podemos concluir que tanto el flujo como el transporte de especies se comporta coherentemente.

La cantidad de trazador que al cabo de un cierto tiempo escapa a través de la salida es el mismo que el inyectado, así como también las medidas de la concentración en las diferentes secciones son coherentes con las curvas RTD experimentales.

5.3. Resultados OBR con deflectores móviles (MRF)

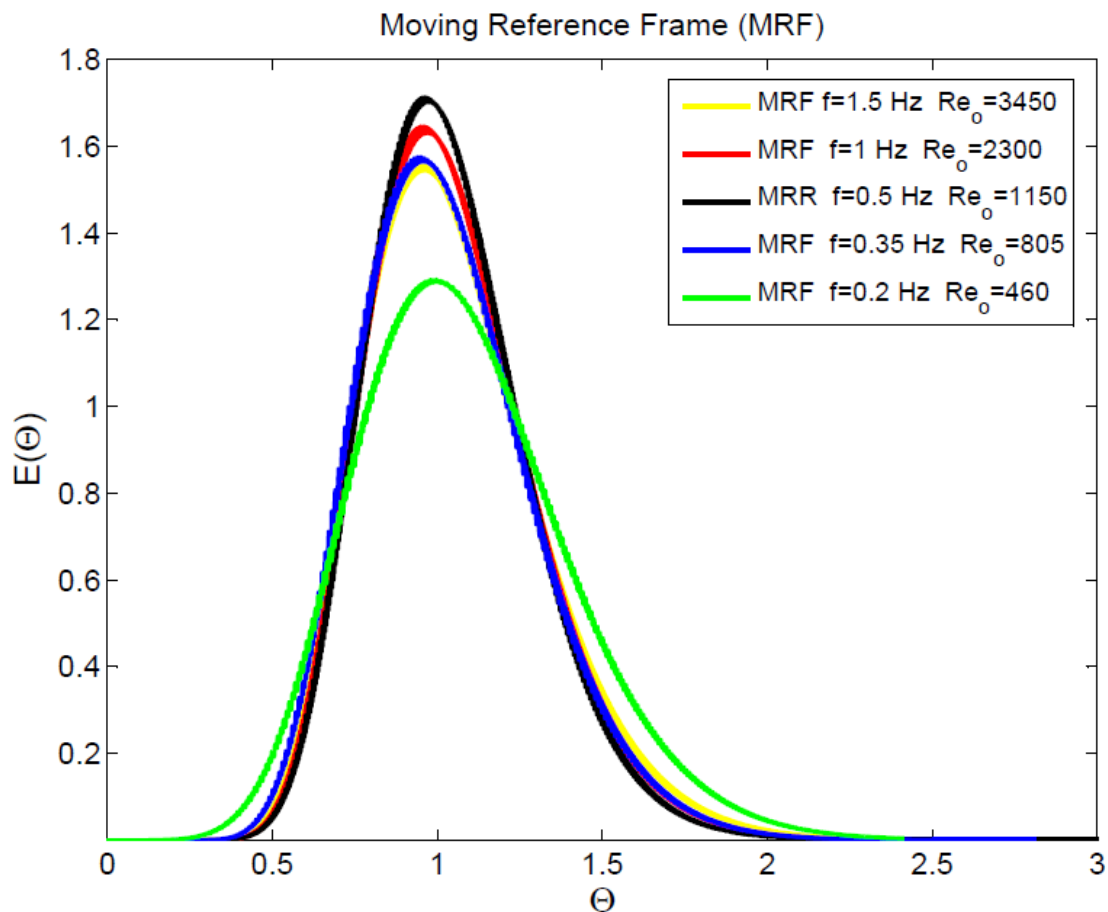


Figura 5.7- Moving Reference Frame $L/P=70$, $Re_n=230$, $St=0.132$

En la Figura 5.7 se representa las curvas RTD adimensionales para la sección $L/P=70$ y diferentes frecuencias.

Se observa que al modificar la frecuencia, se modifica la forma de estas curvas, obteniéndose un óptimo para $f=0.5$ Hz ($Re_o/Re_n=5$). Podemos comparar estos resultados con los obtenidos en el apartado 3.8.2, y observar como en el caso de flujo oscilatorio el óptimo se alcanzaba para $f=0.35$ Hz ($Re_o/Re_n=3.5$).

Esta diferencia puede ser causada por la naturaleza del flujo oscilatorio, mientras que en el OBR con flujo oscilatorio aparecen zonas muertas en la proximidad de las paredes y esquinas de los diafragmas, en el OBR con diafragmas móviles estas zonas muertas no existe. Al aparecer zonas muertas se necesita de una mayor velocidad del flujo para generar vórtices con más intensidad capaces de arrastrar la especie atrapada en la zona muerta, y por lo tanto de un mayor Re_o .

5.4. Resultados OBR con deflectores móviles y flujo oscilatorio (MRF)

En este apartado vamos a estudiar la superposición de un OBR con deflectores móviles y flujo oscilatorio.

Se han estudiado diferentes casos, dependiendo del desfase entre el movimiento del flujo a la entrada y los deflectores móviles. Las ecuaciones que gobiernan el OBR son la velocidad del flujo a la entrada del reactor u_{flujo} y la velocidad de las placas móviles $u_{deflector}$.

$$u(t)_{flujo} = u_{net} + u_{osc} = u_{net} + 2\pi f x_0 \sin(2\pi f t)$$

$$u(t)_{deflector} = 2\pi f x_0 \sin(2\pi f t - \delta)$$

donde δ tomará los valores $0, \frac{\pi}{2}, \pi, \frac{3\pi}{2}$.

Todos los casos se han estudiado para $Re_n=230$, $Re_o=2300$, $f=1\text{Hz}$, $St=0.132$.

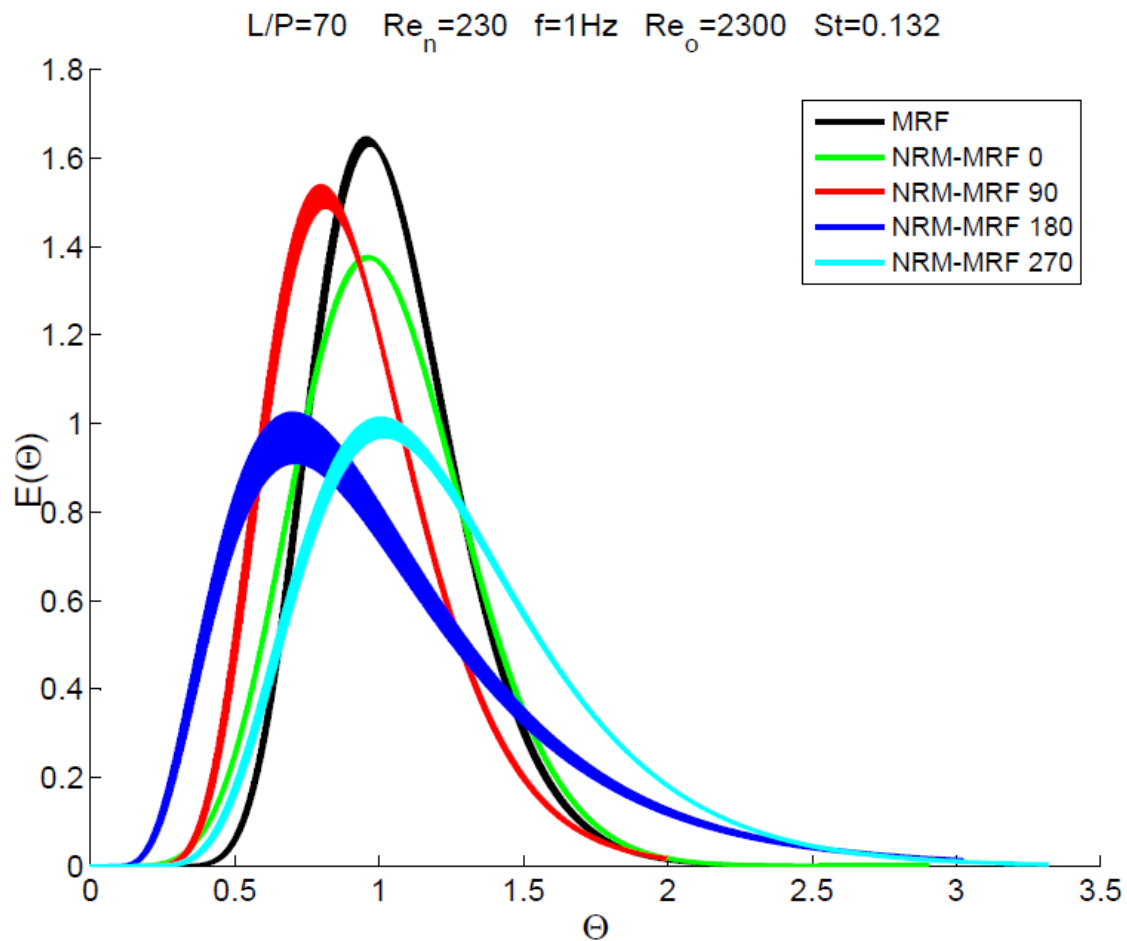


Figura 5.8- OBR con deflectores móviles y flujo oscilatorio a la entrada para diferentes desfases

En la Figura 5.8 se observa cómo se alcanza un óptimo para el caso de deflectores móviles sin flujo oscilatorio a la entrada (MRF). Al superponer el movimiento de los deflectores con el flujo oscilatorio a la entrada se alcanzan velocidades superiores en el interior del reactor, provocando un buen mezclado, pero una mayor dispersión axial.

El caso NRM-MRF sin desfase consigue una curva perfectamente centrada en $\Theta=1$, pero con una mayor varianza debido a una mayor dispersión axial.

En los demás casos, el desfase provoca que la curva no se encuentre centrada en $\Theta=1$.

Por lo tanto podemos concluir que combinar conjuntamente un flujo oscilatorio a la entrada del reactor con diafragmas móviles no mejora la generación de condiciones de flujo pistón (*plug flow*).

Quizás, para desechar la idea de combinar el flujo oscilatorio con los diafragmas móviles sería necesario de un estudio más profundo, modificando parámetros como la frecuencia de oscilación, que no tendría por qué ser la misma en los dos casos así como el estudio de otros desfases entre la velocidad del flujo y los deflectores.

Capítulo 6: Malla deformable

En este capítulo se modeliza un OBR con deflectores móviles utilizando la metodología de **Malla Deformable** (*Dynamic Mesh*) y compararemos si la metodología *Moving Reference Frame* y *Malla Deformable* son equivalentes.

6.1. Metodología Malla deformable.

6.1.1. Definición de la malla dinámica en FLUENT.

Para modelar en FLUENT el desplazamiento axial de los discos a lo largo del dominio computacional se utiliza una malla dinámica, *dynamic mesh*. Existen tres métodos de mallado dinámico disponibles:

- **Smoothing:** el desplazamiento de una pared móvil comprime o expande las capas uniformemente (Figura 6.1).
- **Layering:** el desplazamiento de una pared móvil comprime la capa contigua j hasta alcanzar un tamaño mínimo h_{min} uniendo la capa j con la adyacente i , o expande la capa contigua j hasta alcanzar un tamaño máximo h_{max} dividiendo la capa j en j y k (Figura 6.2).
- **Remeshing:** con el desplazamiento de una pared móvil se rehace el mallado localmente (Figura 6.3).

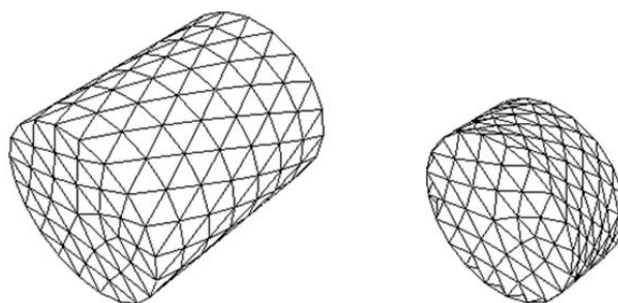


Figura 6.1- Dynamic mesh. Smoothing mesh method

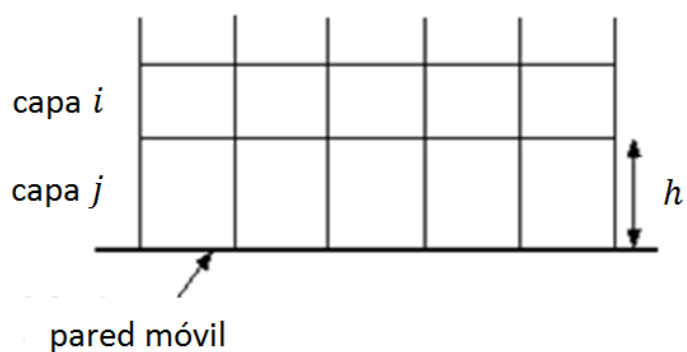


Figura 6.2- Dynamic mesh. Layering mesh method

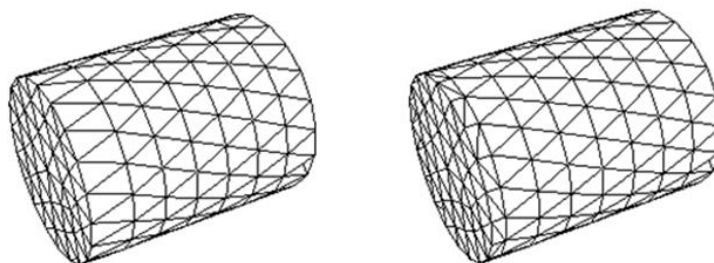


Figura 6.3- Dynamic mesh. Remeshing mesh method

El método seleccionado para modelar el movimiento oscilatorio de los deflectores en el interior del reactor es el de **layering** puesto que sus características se adecúan al mallado estructurado diseñado y la cinemática del modelo. La metodología de simulación que se describe a continuación ha sido adaptada del tutorial de FLUENT *Using Dynamic Meshes* sobre mallados dinámicos.

6.1.2. Simulación de casos sucesivos mediante una UDF

La discretización del ciclo temporal implica la resolución numérica de un elevado número de casos. A partir de la simulación estacionaria del caso inicial, cada nuevo caso se obtiene **actualizando la velocidad de los discos** y aplicando al caso que le precede un **paso de tiempo Δt** . Las hipótesis de simulación se mantienen, cambiando únicamente del modelo estacionario al modelo no estacionario. El software FLUENT permite realizar el cambio de velocidad de un caso al siguiente de manera cómoda y automática, mediante una función definida por el usuario (*User-Defined Function, UDF*).

La programación de una *UDF* en FLUENT se realiza en lenguaje C y permite resolver ciertas operaciones, por ejemplo: inicializar perfiles de velocidad no uniformes, trabajar con condiciones de contorno dependientes del tiempo y/o el espacio, modificar las propiedades de los materiales, etc. FLUENT permite trabajar con dos tipos de *UDFs*:

- **Interpretada** (*interpreted*): el código se ejecuta línea a línea, no necesita un compilador independiente, utiliza más memoria y tiene limitaciones en cuanto a las tareas que puede resolver.
- **Compilada** (*compiled*): utiliza una biblioteca, requiere compilador independiente, utiliza menos memoria y no tiene limitación en cuanto a las tareas a resolver.

Para la oscilación del fluido, la actualización de gasto másico y paso de tiempo sí se puede abordar fácilmente con una *interpreted UDF*. Sin embargo, para la oscilación de los discos es necesario recurrir a una *compiled UDF*, puesto que la modificación de la posición de los discos dentro del dominio computacional a lo largo del ciclo de oscilación se realiza mediante la función `DEFINE_CG_MOTION` no permitida en las interpretadas.

La programación de la **UDF compilada** que se aplica, de nombre `obr.c` se adjunta a continuación en la Figura 6.4. En [6] se explica la instalación y configuración del compilador, así como los pasos para crear la biblioteca necesaria.

```
# include "udf.h"
# define PI 3.1415926536
# define x0 0.015 /* amplitud de oscilacion, en m */
# define f 1 /* frecuencia de oscilacion, en Hz */

DEFINE_CG_MOTION(ofr, dt, vel, omega, time, dtime)
{
    real v;
    real w = 2 * PI * f;
    v = w * x0 * sin(w * time);
    vel[0] = v;
}
```

Figura 6.4- Programación de la UDF compilada (obr.c)

6.1.3. Aspectos constructivos del dominio computacional

La simulación del dominio computacional entra en conflicto con el método *layering*. Cuando el ciclo de oscilación avanza desde $t/\tau = 0$ hasta $t/\tau < 0,5$, la región de recorrido del pistón (de longitud $2x_0$) se va reduciendo en sentido del movimiento, de manera que las celdas contiguas a la región de remanso se comprimen hasta unirse con las adyacentes (Figura 6.5). Nótese que en sentido opuesto al movimiento, las celdas se expanden hasta dividirse de manera análoga.

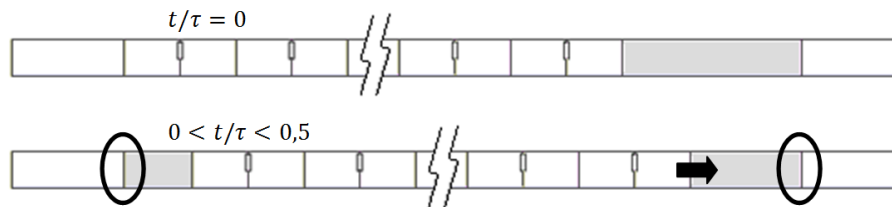


Figura 6.5- Expansión y compresión de celdas en la región de recorrido.

Siguiendo este procedimiento, en $t/\tau = 0,5$ la **región de recorrido** tiene **longitud cero** en el sentido del movimiento, no existiendo celdas en dicha parte del dominio, lo cual no es posible desde el punto de vista de la convergencia (este problema se repite a la inversa para $t/\tau = 1$). La solución consiste en prever una **distancia de seguridad** dentro de las regiones de remanso para que en ningún caso exista longitud de recorrido nula (Figura 6.6).

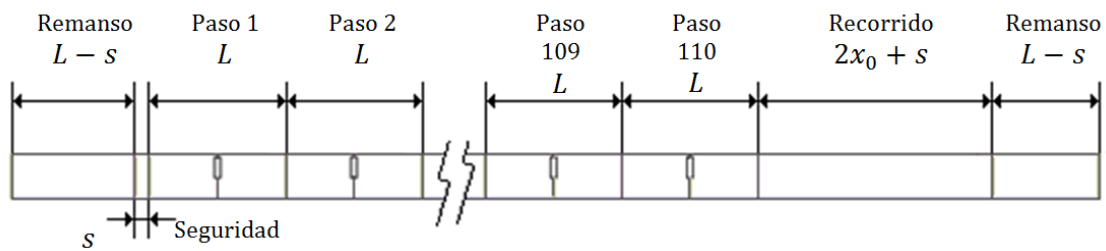


Figura 6.6- Regiones de nuestro OBR.

Pese a la previsión de esta distancia de seguridad se han presentado **problemas de convergencia** para el paso de tiempo $\Delta t = 0,013 \text{ s}$, que en principio satisface la condición CFL. Estos problemas radican en la creación de celdas con área negativa, en instantes aparentemente aleatorios a lo largo del ciclo de oscilación. Se ha comprobado que la reducción del paso de tiempo retrasa la aparición del problema a instantes posteriores en el ciclo, pero no se ha evidenciado el motivo. Con un paso de tiempo $\Delta t = 0,01 \text{ s}$ sí se consigue evitar la aparición de celdas con área negativa para una frecuencia $f=1\text{Hz}$ o inferior.

6.1.4. Denominación de las regiones fluidas en Fluent.

Nuestro OBR estará formado por diferentes regiones que es importante estudiar para posteriormente definir las zonas en la malla dinámica.

La zona de *Remanso 1* se encontrará en la entrada del OBR, y estará separada del OBR por la superficie *Interior-156* (en esta zona es donde se crearán y se destruirán nodos dependiendo si los discos se mueven en sentido positivo o negativo)

La zona de *Remanso 2* deberá tener una longitud mayor a $2x_0$, que es la distancia que un disco recorrerá en todo su movimiento. En la superficie *Interior-14* se crearán y se destruirán los nodos al igual que ocurría en la superficie *Interior-156*. Finalmente tenemos una zona *Layering* que en nuestro caso la hemos tomado con una longitud igual a las zonas de Remanso.

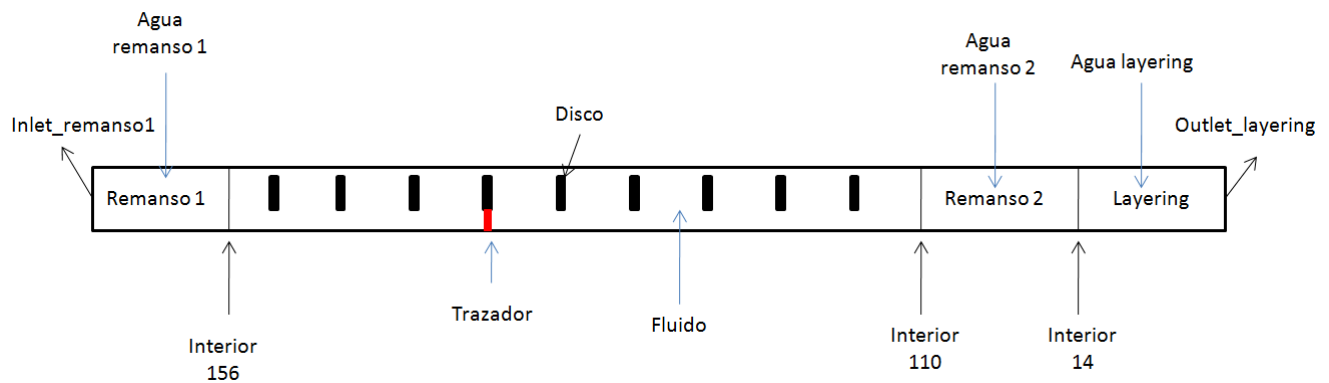


Figura 6.7. Denominación de aristas del dominio computacional en GAMBIT.

Los nodos en las zonas de Remanso y Layering deben tener un tamaño axial igual en todo su dominio, y del mismo tamaño que los nodos que se encuentra en contacto con las superficies *Interior-156* y *110*.

Como ya he mencionado anteriormente, en las zonas *Interior 156* y *14* los nodos se irán creando y destruyendo según el movimiento de los discos. Es importante que en el momento de la creación y destrucción, este nodo tenga el mismo tamaño que su nodo contiguo para que no se creen zonas de área negativa.

6.1.5. Definición de parámetros y zonas en la malla dinámica en Fluent.

Una vez que la *UDF* ha sido compilada correctamente y creada la biblioteca correspondiente [6], se procede a definir los **parámetros** de funcionamiento del mallado dinámico que se configuran como se muestra en la Figura 8, accediendo a través del desplegable *Define > Dynamic Mesh > Parameters*.

A continuación se establecen las **zonas** de malla dinámica en el desplegable **Define > Dynamic Mesh > Zones**, comprobando previamente que la *UDF* empleada está disponible en la pestaña **Motion Attributes > Motion UDF/Profile** con la extensión `::libudf` (véase la Figura 6.9). En la *Tabla 6.3* se recoge la descripción de las zonas necesarias.

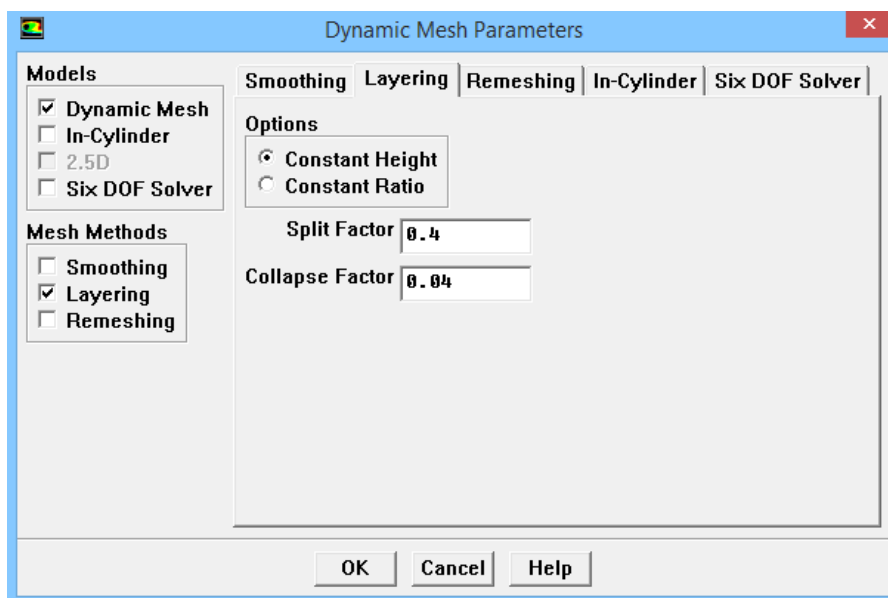


Figura 6.8- Definición de parámetros del mallado dinámico

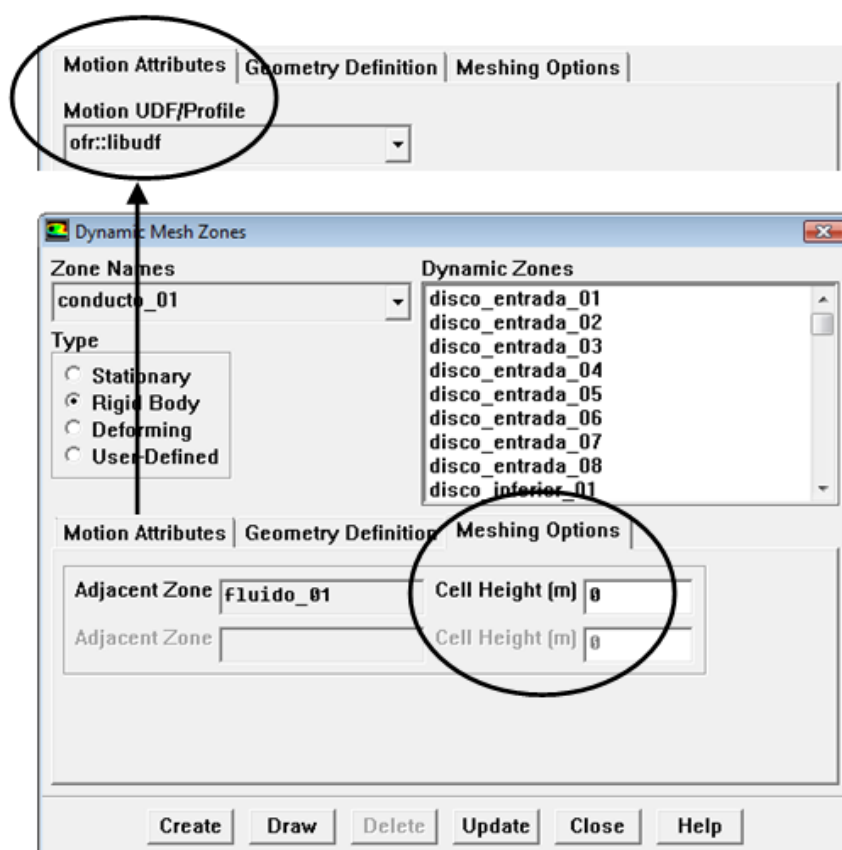


Figura 6.9- Definición de zonas del mallado dinámico.

Nombre	Type	Cell Height	
Disco	Rigid Body	0	-
Fluido	Rigid Body	-	-
Trazador	Rigid Body	-	-
Agua_remanso2	Rigid Body	-	-
Interior-156	Stationary	0.001069	0
Interior-14	Stationary	0	0.001069

Tabla 6.1- Definición de zonas del mallado dinámico.

Nótese que el valor de la altura *Cell Height* para las fronteras de entrada y salida (Interior-156 y Interior-14) se hace coincidir con la distancia axial uniforme entre nodos que se establece para el mallado de las regiones layering y remanso.

6.2. Análisis de la metodología MD

Al igual que en *Moving Reference Frame* en éste caso también hemos realizado un análisis de los resultados obtenidos, tanto de los patrones de flujo como del transporte de especies, y podemos concluir que el transporte de especies utilizando la metodología de **Malla deformable** para modelizar un OBR con deflectores móviles se comporta coherentemente.

La metodología *Malla Deformable* presenta un inconveniente frente a *Moving Reference Frame*, y éste es la generación de áreas negativas.

En el proceso de generación y destrucción de los nodos para modelizar el movimiento de los diafragmas nos hemos encontrado con un error al generarse nodos de área negativa. Para solucionar el problema, es necesario que los nodos que se generan/destruyen tengan la misma dimensión axial que los contiguos, es decir, todos los nodos que se encuentran en la zona de remanso y layering deben tener el mismo tamaño longitudinal.

Esto solo no es suficiente para evitar el error, sino que también debemos utilizar un *time step* inferior con respecto a la metodología *Moving Reference Frame*. No tenemos un criterio para determinar cuál debe ser el *time step* óptimo, por lo que se ha encontrado por prueba y error.

6.3. Resultados OBR con deflectores móviles (MD)

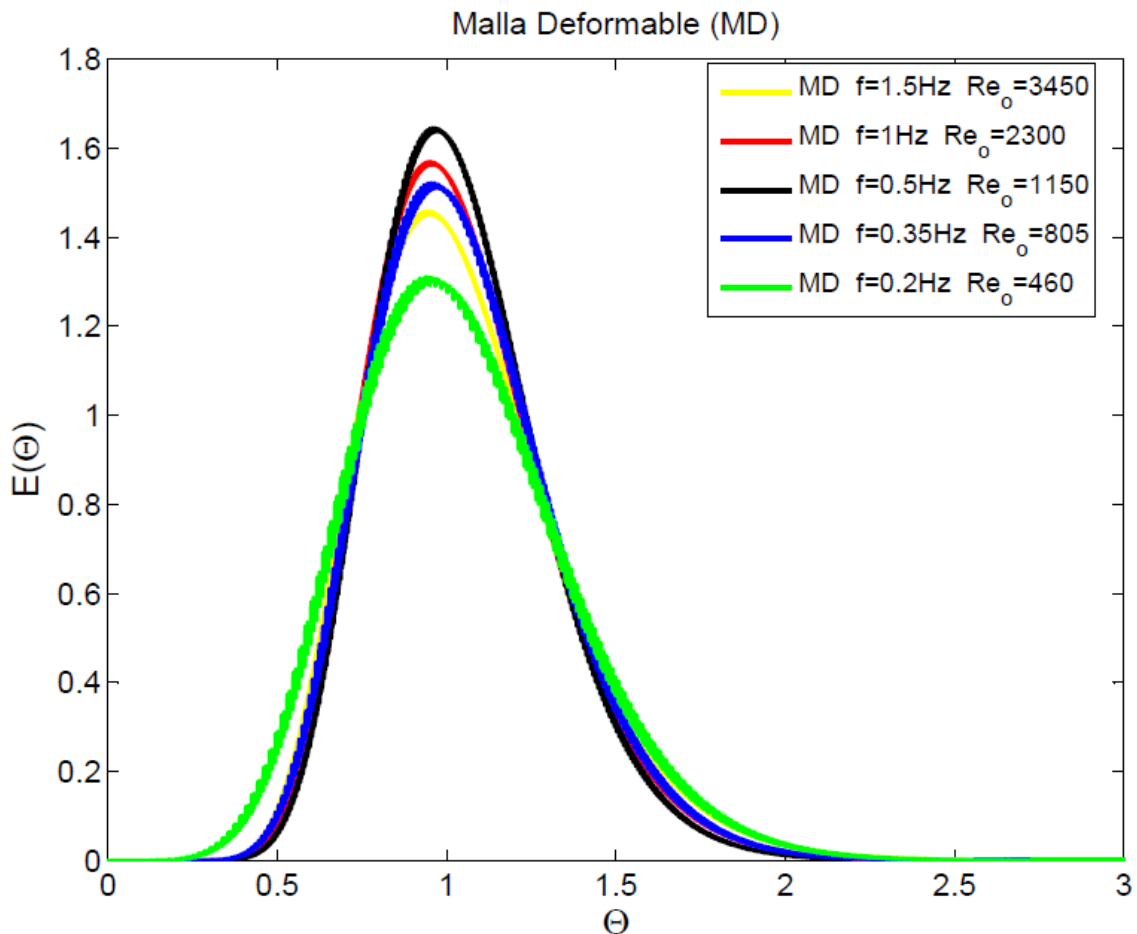


Figura 6.10- Malla Deformable $L/P=70$, $Re_n=230$, $St=0.132$

En la Figura 6.10, se representan las curvas RTD para el caso de un OBR con deflectores móviles utilizando la metodología de Malla Deformable a diferentes frecuencias. Al igual que ocurre en el Capítulo 5 encontramos un óptimo para una frecuencia $f=0.5\text{Hz}$ con una relación $Re_n/Re_o=5$.

6.4. ¿Son Moving Reference Frame (MRF) y Malla Deformable (MD) dos metodologías equivalentes?

Tanto **Moving Reference Frame** como **Malla Deformable**, son metodologías para resolver el movimiento de los diafragmas. Una vez resuelto el mismo problema con los dos métodos podemos preguntarnos si los resultados son equivalentes.

Vamos a comparar en primer lugar los perfiles de velocidad en una sección situada entre dos diafragmas para MRF y MD.

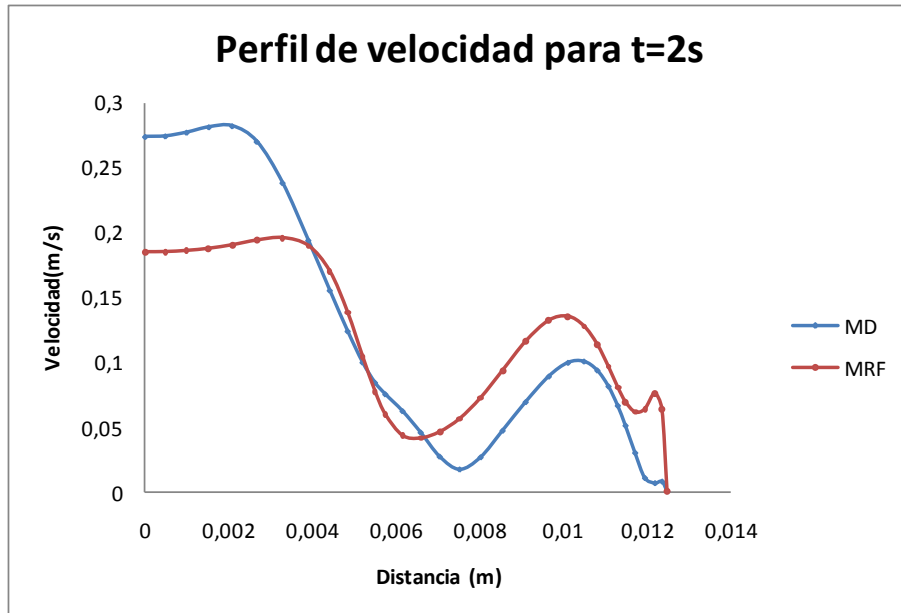


Figura 6.11- Perfil de velocidad para t=2s

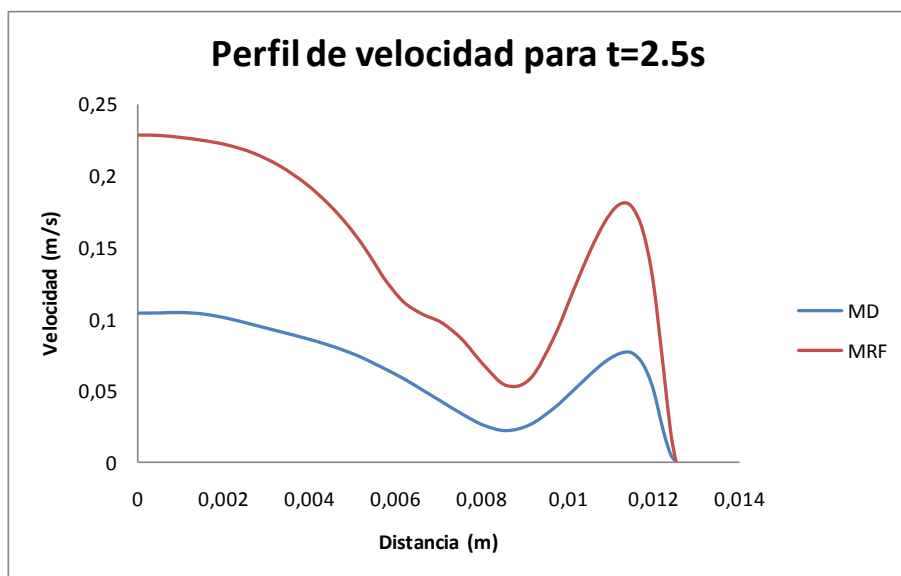


Figura 6.12- Perfil de velocidad para t=2.5s

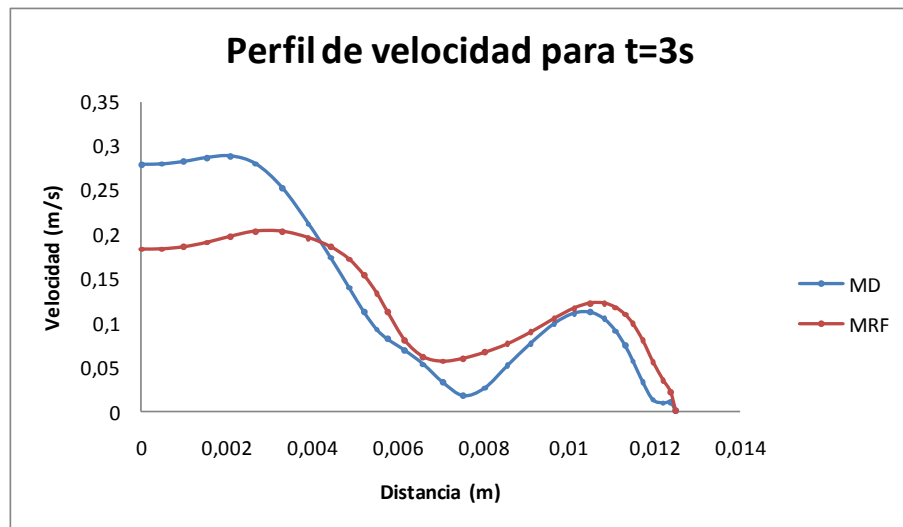


Figura 6.13- Perfil de velocidad para t=3s

Como se observa en las Figuras 6.11 6.12, 6.13, los perfiles de velocidad para el caso *Moving Reference Frame* (MRF) y *Malla Deformable* (MD) siguen la misma tendencia aunque no coinciden perfectamente. El flujo en el interior de un OBR se puede definir como "caótico" por lo que resultados como los obtenidos, pueden bastar para concluir que ambas metodologías son equivalentes.

También se ha comprobado que las curvas RTD sean equivalentes (ver Figura 6.14, 6.15, 6.16, 6.17 y 6.18)

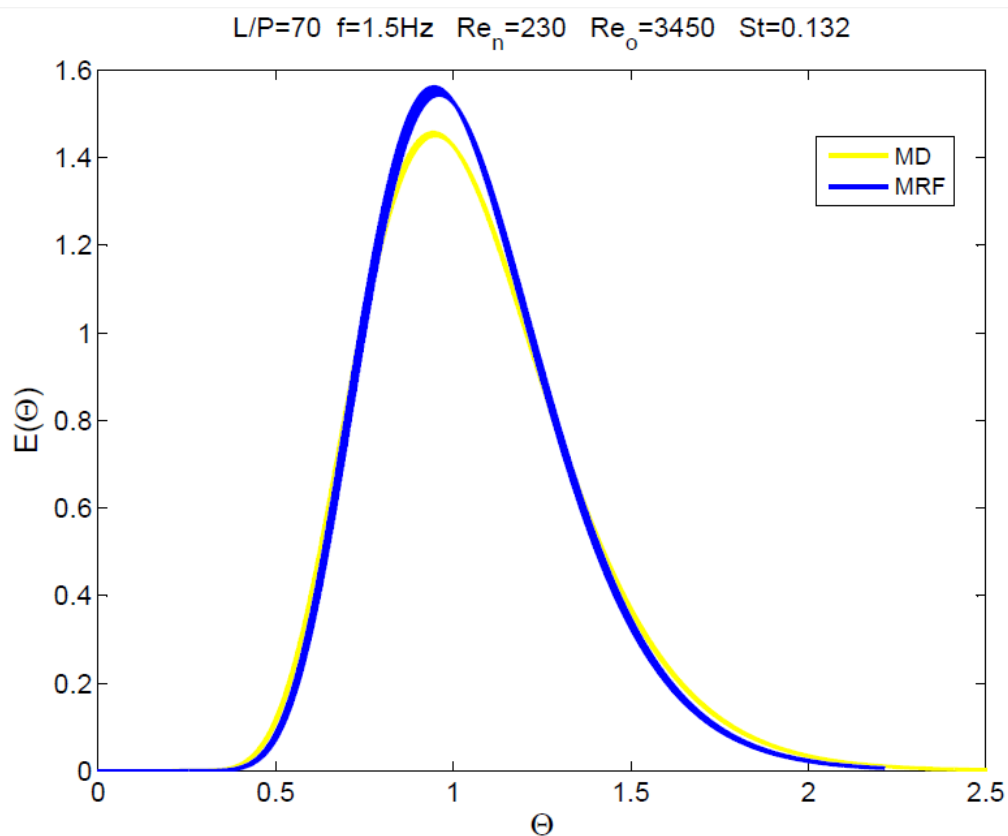


Figura 6.14- Comparación entre MD y MRF $f=1.5\text{Hz}$

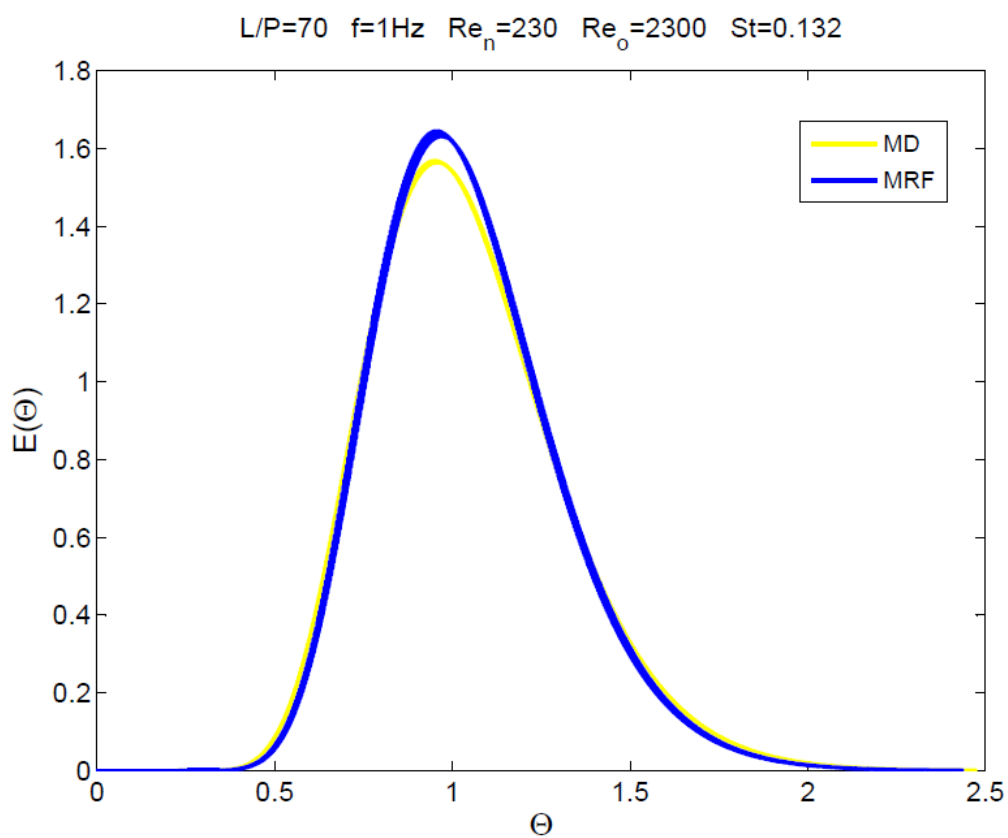


Figura 6.15- Comparación entre MRF y MD $f=1\text{Hz}$

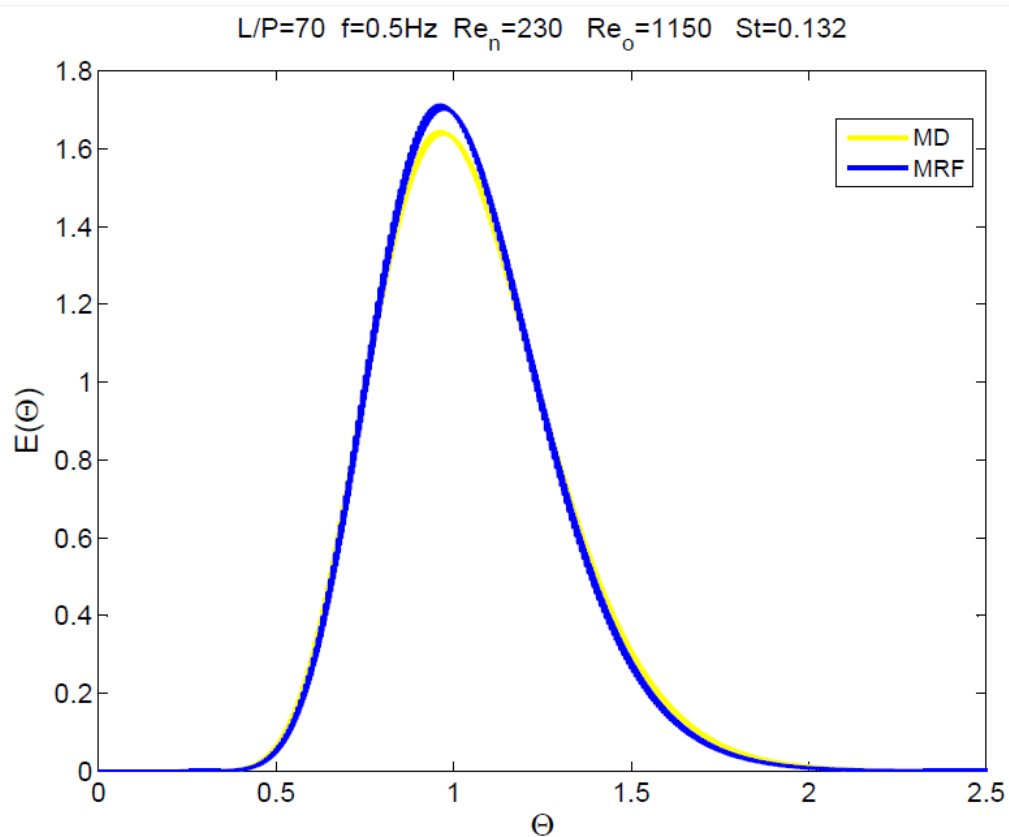


Figura 6.16- Comparación entre MRF y MD $f=0.5\text{Hz}$

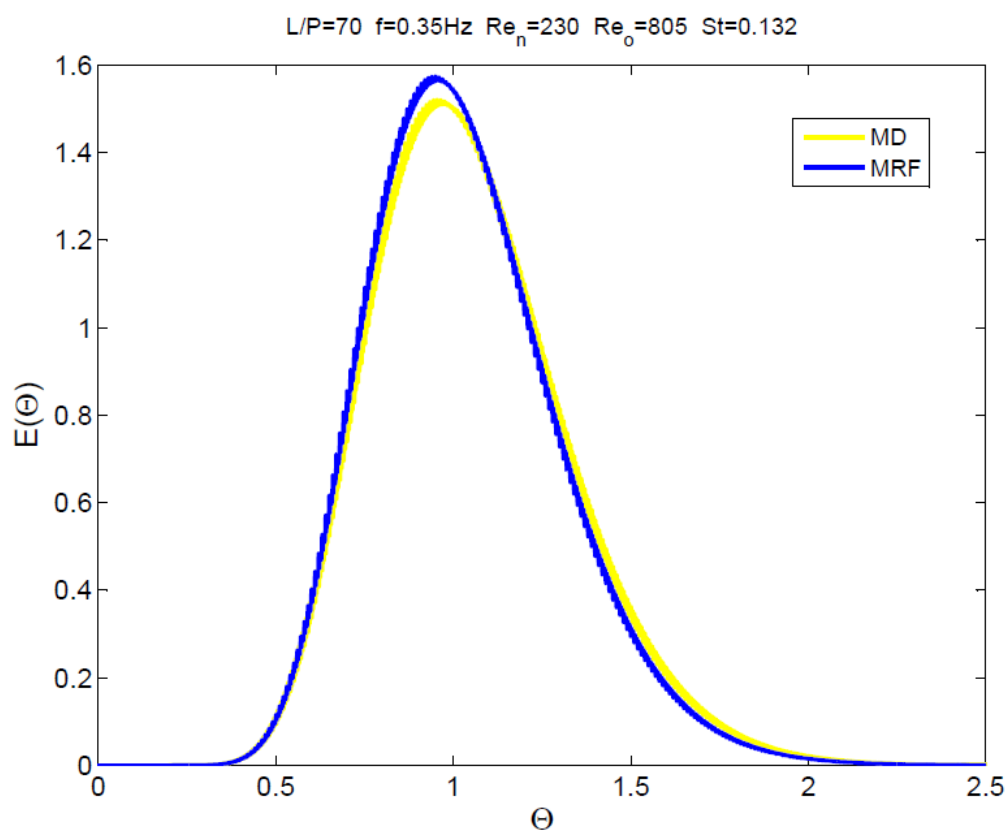


Figura 6.17- Comparación entre MRF y MD $f=0.35\text{Hz}$

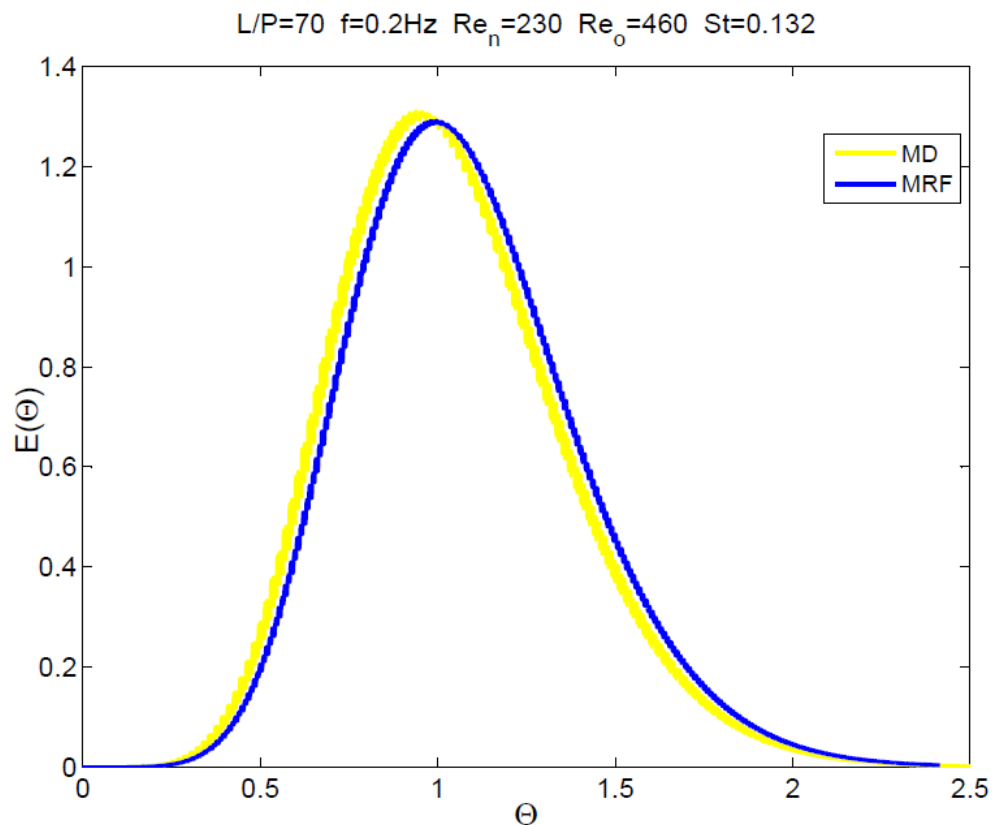


Figura 6.18- Comparación entre MRF y MD $f=0.2\text{Hz}$

En las curvas RTD se observa como ambas curvas son casi coincidentes. Esta diferente puede ser causada por usar una discretización temporal distinta.

6.5. Comparación entre Flujo oscilatorio y Diafragmas móviles.

En la Figura 6.19 se han representado las curvas RTD para el caso de un OBR con flujo oscilatorio (NRM) y placas móviles (MRF) con las mismas condiciones de operación.

El movimiento de las placas genera un buen mezclado radial sin demasiada dispersión axial, consiguiendo condiciones de flujo pistón (*plug flow*).

En el reactor de flujo oscilatorio se alcanzan mayores velocidades por la propia naturaleza del flujo a la entrada del reactor, provocando que tengamos una mayor dispersión axial. También hay que tener en cuenta que en un OBR con diafragmas fijos, aparecen zonas muertas a causa de la geometría. Estas zonas se encuentran en las zonas próximas a la pared, así como esquinas de los diafragmas. Son necesarias una mayor turbulencia e intensidad en el flujo para que la especie consiga escapar de estas zonas, pero por contra generando una mayor dispersión axial.

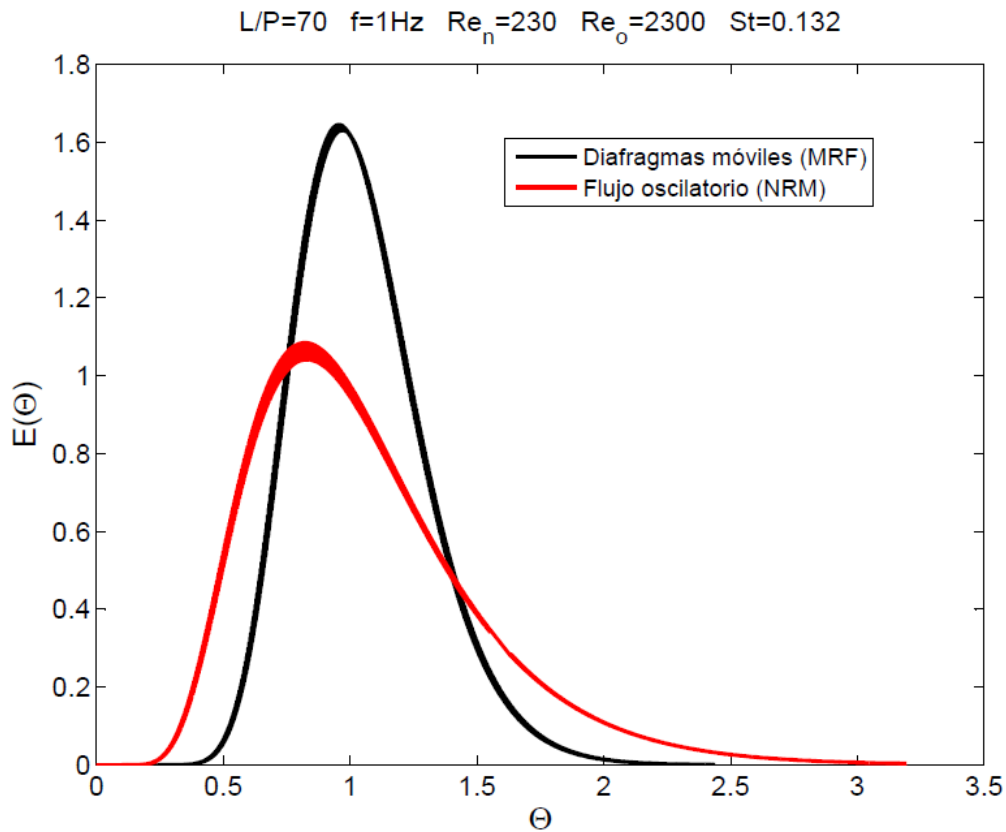


Figura 6.19- Curvas adimensionales para OBR con diafragmas móviles y OBR con flujo oscilatorio

Una vez comparado el reactor OBR con flujo oscilatorio y diafragmas móviles para las mismas condiciones de operación, vamos a comparar el mismo reactor pero trabajando cada uno en su punto óptimo de funcionamiento.

El OBR con diafragmas móviles alcanza su óptimo para $f=0.5\text{Hz}$ $Re_o=1150$ $Re_o/Re_n=5$, mientras que con flujo oscilatorio las condiciones son $f=0.35\text{Hz}$ $Re_o=805$ $Re_o/Re_n=3.5$.

En la Figura 6.20 podemos visualizar las curvas RTD adimensionales para estas condiciones de operación.

Por lo tanto podemos concluir que el OBR con deflectores móviles consigue un comportamiento más cercano al flujo pistón ideal.

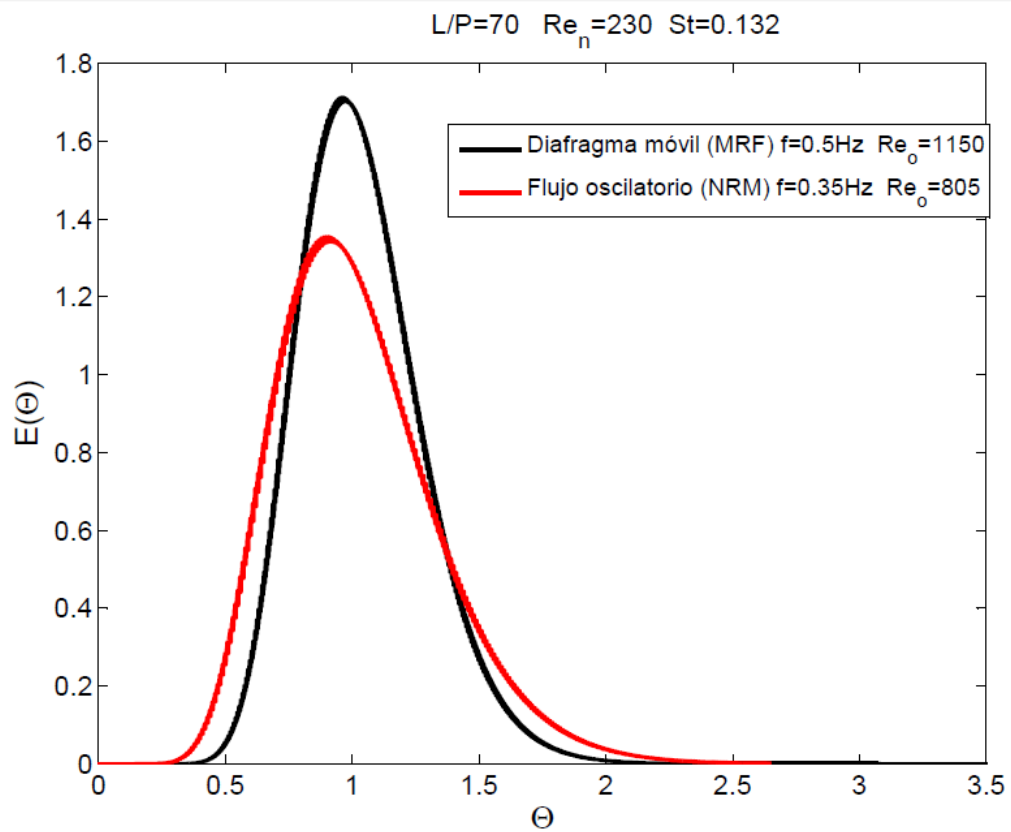


Figura 6.20- Curvas adimensionales para OBR con diafragmas móviles y OBR con flujo oscilatorio

Conclusiones del estudio

El **coste computacional** necesario para resolver un problema de transporte de especies en un OBR con una geometría dada es función de las condiciones de operación. Al aumentar el Reynolds neto (con la premisa de un mismo fluido y geometría) disminuye el tiempo de cálculo, ya que el trazador avanza con una mayor velocidad, mientras que al aumentar la frecuencia aumenta el coste al ser necesario resolver un mayor número de pasos de tiempo (*time step*) para resolver un mismo espacio temporal.

Un reactor en **tubo liso sin diafragmas con un flujo laminar** con muy bajo número de Reynolds genera un perfil de velocidad parabólico. La velocidad será máxima en el centro del tubo mientras que en las proximidades de las paredes tiende a cero. Esta distribución de velocidades implica que en el transporte de especies no tengamos un mezclado radial y que las partículas no se desplacen formando un frente plano, sino que aquellas que se encuentran en la zona central avanzan con una velocidad mayor que las que se encuentran en las proximidades de la pared. Distintas velocidades de avance de las partículas provoca que el tiempo de residencia sea muy dispar pudiéndose generar productos secundarios no deseados en la reacción.

Aumentando el número de Reynolds hasta alcanzar un **régimen turbulento** conseguimos un perfil de velocidad más plano. Con estas condiciones la especie avanza siguiendo un perfil plano, aunque sin mezclado radial. Esta distribución sí mejoraría los tiempos de residencia, pero necesitaríamos un tubo muy largo para que las sustancias permanezcan en su interior el tiempo necesario hasta que se produzca la reacción.

Todo lo expuesto anteriormente motiva el estudio de reactores de flujo oscilatorio (OBR) que son equipos tubulares aptos para el mezclado radial, en los que se superpone un flujo neto y un flujo oscilatorio.

Hemos intentado mejorar el mezclado en un OBR con flujo oscilatorio modificando las condiciones del flujo a la entrada.

Implementando las condiciones de **Abnormal oscillatory conditions** (ABN) y **Normal oscillatory conditions** (NRM) hemos podido analizar el mezclado para diferentes condiciones de operación.

Tanto para NRM como ABN se obtiene un óptimo en la curva RTD en función de la relación Re_o/Re_n . En nuestro caso NRM y ABN obtiene un óptimo para $f=0.35$ $Re_o/Re_n=3.5$

$Re_o/Re_n < 3.5$ empeoran la curva, al tener menos turbulencia se generan zonas muertas en las zonas próximas a la pared y esquinas de los diafragmas que retienen la especie. $Re_o/Re_n > 3.5$ empeoran la curva ya que al aumentar Re_o aumenta la dispersión axial, obteniéndose curvas más simétricas, pero con mayor varianza.

Abnormal oscillatory conditions (ABN) mejora la curva de RTD con respecto a NRM, pero no de forma significativa. Un problema en los OBR con flujo oscilatorio son la aparición de zonas muertas en los elementos insertados. Velocidades más altas en ciclos positivos e inferiores en los ciclos negativos ayudan a la eliminación de las zonas muertas, y permite que aquellas partículas retenidas en una zona muerta en un ciclo positivo tenga suficiente velocidad como para escapar. La forma de onda ABN permite que el frente de trazador avance sin quedar retenido en zonas muertas y por lo tanto evitando la aparición de colas más largas en las curvas RTD.

En un OBR con **diafragmas móviles** se obtienen mejores curvas RTD. Esto es debido a que en un OBR con flujo oscilatorio se alcanzan velocidades pico mucho más altas que con diafragmas fijos (más del doble) provocando una mayor dispersión axial. Un OBR con diafragmas móviles, consigue un buen mezclado radial sin necesidad de velocidades altas y por tanto con una menor dispersión axial, además en un OBR con diafragmas móviles no hay zonas muertas debido a la naturaleza oscilatoria de las placas. Las zonas muertas provocan "colas largas" en las curvas de RTD como ocurre con OBR con diafragmas fijos.

Al **combinar flujo oscilatorio con diafragmas móviles** no se obtienen mejoras con respecto a un OBR con diafragmas móviles puro. Se han estudiado distintos desfases entre el flujo a la entrada y el movimiento de los diafragmas observándose una translación de la curva RTD con respecto a $\Theta=1$. Para desechar la idea de combinar en un mismo OBR el movimiento de los deflectores con un flujo oscilatorio a la entrada se deberían de estudiar otras condiciones de operación con diferentes frecuencias y desfases.

La **modelización de deflectores móviles** con la metodología **Moving Reference Frame** (MRF) y **Malla Deformable** (MD) se puede considerar equivalentes y validos para modelizar reactores de este tipo después de los resultados obtenidos, teniendo en cuenta que el flujo en un OBR se define como "caótico".

Hay que tener en cuenta que en Malla Deformable aparece el problema de generación de celdas de área negativa, limitando el *time-step* a utilizar, siendo en ocasiones más restrictivo que la condición CFL.

Referencias bibliográficas

- [1] A. N. Phan, A. P. Harvey, "Effect of geometrical parameters on fluid mixing in novel mesoscale oscillatory helical baffled designs," 2011.
- [2] P. Stonestreet, "The effects of oscillatory flow and bulk flow components on residence time distribution in baffled tube reactors," 1999.
- [3] A. N. Phan, A. P. Harvey, "A mixing-based design methodology for continuous oscillatory flow reactors," 2002.
- [4] N. Xiong-Wei, "On the discussion of the dimensionless groups governing oscillatory flow in a baffled tube," 1997.
- [5] O. Levenspiel, *Chemical Reaction Engineering*, 2 ed. New York: John Wiley & Sons, 1999.
- [6] E. G. Mikko Manninen, Kirsi Immoneda and Xiong-Wei Ni, "Evaluation of axial dispersion and mixing performance in oscillatory baffled reactor using CFD," 2012.
- [7] R.M.C. Neves Saraiva, M.R. Mackley, "The quantitative description of fluid."
- [8] R.M.C. Neves Saraiva, M.R. Mackley, "The simulation of stretch rates for the quantitative prediction and mapping of mixing within a channel flow," 1995.
- [9] A. N. Phan, A. P. Harvey, "Development and evaluation of novel design of continuous mesoscale oscillatory baffled reactors," 2011.
- [10] FLUENT, "User's Guide."
- [11] GAMBIT, "User's guide". (2014). Available:
http://202.118.250.111:8080/FLUENT/Gambit13_help/modeling_guide/mg0302.htm
- [12] H. Martínez Rodríguez, "PFC: Avances en la simulación numérica de reactores de flujo oscilatorio."
- [13] J.P Solano, S. Espín, A.N. Phan, A.P. Harvey, "Numerical study of the flow pattern and heat transfer enhancement in oscillatory baffled reactor with helical coil inserts " 2012.
- [14] H. Jhay, .N Xiong-Wei, "A numerical study on the scale-up behavior in oscillatory baffled columns," 2005.
- [15] N. Xiong-Wei, "Computational fluid dynamic modelling of flow patterns in an oscillatory baffled column," 2002.
- [16] *TECPLOT User's guide*.
- [17] J.P Solano, P.G. Vicente, A. Viedma, "Flow pattern assessment in tubes of reciprocating scraped surface heat exchangers," 2012.